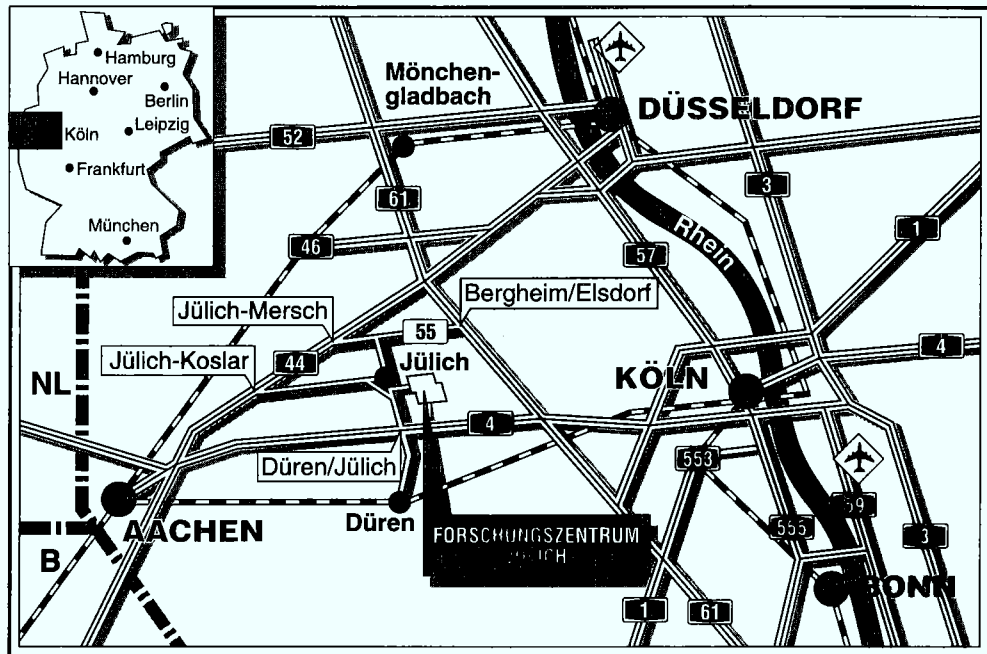


*Institut für Plasmaphysik
Assoziation EURATOM-KFA*

**Eine Monte-Carlo-Methode zur
Untersuchung von Verunreinigungen
in Tokamak-Plasmen**

Dirk Reiser



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3173

ISSN 0944-2952

Institut für Plasmaphysik Jül-3173

Assoziation EURATOM-KFA

Zu beziehen durch : Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon: 02461/61-61 02 · Telefax: 02461/61-61 03 · Telex: 833 556-70 kfa d

Eine Monte-Carlo-Methode zur Untersuchung von Verunreinigungen in Tokamak-Plasmen*

Dirk Reiser

*Teil der geplanten Dissertation des Dirk Reiser, Universität Düsseldorf

Abstract

Die numerische Simulation des Verunreinigungstransports in Tokamak-Randschicht-Plasmen ist ein wesentliches Werkzeug zum Verständnis sowohl globaler als auch spezifischer Detailprobleme in der Physik der Plasma-Randschicht. Anders als bei bisher verwendeten Simulations-Codes üblich leiten wir in der vorliegenden Arbeit den Kalkül streng aus dem theoretischen Hintergrund ab. Ausgangspunkt sind die kinetischen Gleichungen für ein vollständig ionisiertes Plasma, in dem die geladenen Teilchen über Coulomb-Stöße wechselwirken. Die Verunreinigungen werden in der Testteilchen-Näherung betrachtet und die Problemstellung damit auf die Lösung einer einzelnen linearen kinetischen Gleichung reduziert. Es werden Annahmen über das Hintergrundplasma und die elektromagnetischen Felder gemacht, die es erlauben, eine kinetische Gleichung vom Fokker-Planck-Typ sowohl in Phasenraumkoordinaten als auch in driftkinetischen Variablen herzuleiten. Zur numerischen Lösung der kinetischen Gleichung vom Fokker-Planck-Typ wird eine exakte Monte-Carlo-Methode vorgeschlagen. Beispiele für verwandte stochastische Prozesse, die eine analytische Lösung gestatten, demonstrieren die Leistungsfähigkeit und Korrektheit der Methode. Der Monte-Carlo-Algorithmus für reine Diffusionsprozesse wird um Teilchenumwandlungsprozesse wie Ionisation und Rekombination erweitert. Damit werden erste praktische Rechnungen für TEXTOR-Plasmen durchgeführt und diskutiert.

Inhaltsverzeichnis

1	Eine kinetische Gleichung für den Transport geladener Testteilchen im Tokamak-Plasma	2
1.1	Vorbemerkungen	2
1.2	Die Einteilchen-Gleichungen für ein Plasma bei Coulomb-Wechselwirkung	2
1.3	Eine Fokker-Planck-Gleichung für Testteilchen	7
1.4	Eine Fokker-Planck-Gleichung für Testteilchen in driftkinetischen Variablen	10
2	Teilchentransport und Diffusionsprozesse	16
2.1	Vorbemerkungen	16
2.2	Die Chapman-Kolmogorov-Differentialgleichung für Markov-Prozesse	16
2.3	Fokker-Planck-Gleichung und stochastische Differentialgleichung .	19
2.4	Die Monte-Carlo-Methode zur Lösung der Fokker-Planck-Gleichung	20
2.4.1	Beispiel 1: Der Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß	21
2.4.2	Beispiel 2: Die Kramer-Gleichung	26
2.4.3	Beispiel 3: Der Coulomb-Stoßterm	28
3	Einbeziehung von Teilchenerzeugungs- und Teilchenvernichtungsprozessen in das Modell	33
3.1	Vorbemerkungen	33
3.2	Master-Gleichung und Sprungprozesse	33
3.3	Verknüpfung der Diffusions- und Sprungprozesse des physikalischen Modells für die Verunreinigungen	36
4	Ein Monte-Carlo-Code für numerische Anwendungen bei TEXTOR-Plasmen	37
4.1	Vorbemerkungen	37
4.2	Die Grundgleichungen für die Simulation	37
4.3	Weitere Details zu den praktischen Rechnungen	40
4.4	Erste Resultate für Kohlenstoff-Verunreinigungen	44

Kapitel 1

Eine kinetische Gleichung für den Transport geladener Testteilchen im Tokamak-Plasma

1.1 Vorbemerkungen

In diesem Kapitel sollen Bedingungen genannt werden, die es erlauben, ausgehend von einer allgemeinen kinetischen Beschreibung eines vollständig ionisierten Plasmas, eine einzelne lineare kinetische Gleichung für den Transport einer der beteiligten Teilchenspezies abzuleiten. Das resultierende Modell beschreibt den Transport dieser Teilchensorte in der sogenannten Testteilchen-Näherung. Die Testteilchen werden hierbei in ihrer Bewegung über Coulomb-Kräfte von den anderen Teilchensorten im Plasma beeinflusst, wirken aber erstens selbst nicht auf diese Teilchen zurück und wechselwirken zweitens auch nicht untereinander. Das Modell ist also eine angemessene Beschreibungsgrundlage, falls man sich für den Transport einer Spezies interessiert, die nur eine kleine Störung des Gesamtsystems ausmacht. Für die Untersuchung von Verunreinigungen in Tokamak-Plasmen stellt dies zumeist einen sinnvollen Ansatz dar. Die so gewonnene kinetische Gleichung wird im weiteren, unter Ausnutzung einschränkender Annahmen, auf die Form einer Fokker-Planck-Gleichung gebracht, die die Anwendung der Theorie stochastischer Prozesse (Diffusionsprozesse; siehe Kapitel 2) zur Untersuchung des Teilchentransports zuläßt.

1.2 Die Einteilchen-Gleichungen für ein Plasma bei Coulomb-Wechselwirkung

Zur theoretischen Beschreibung des Vielteilchensystems Plasma bedient man sich bei verdünnten Gasen und Plasmen des statistischen Konzepts der Einteilchen-

Verteilungsfunktion. Diese Verteilungsfunktion sei mit $f(\mathbf{z}, t)$ bezeichnet, wobei $\mathbf{z}$ die Zustandsvariablen eines Teilchens umfaßt (zumeist Ortsvektor $\mathbf{x}$ und Geschwindigkeitsvektor $\mathbf{v}$). Die Funktion $f(\mathbf{z}, t)$ stellt eine Wahrscheinlichkeitsdichte im Zustandsraum dar, und $f(\mathbf{z}, t)d\mathbf{z}$ gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß ein Teilchen zur Zeit t im Volumenelement $d\mathbf{z}$ bei $\mathbf{z}$ angetroffen wird. Demzufolge gilt die Normierung:

$$\int f(\mathbf{z}, t)d\mathbf{z} = 1 \quad . \quad (1.1)$$

Die Integration erstreckt sich hierbei über den gesamten Zustandsraum. Aus der Kenntnis der Verteilungsfunktion lassen sich statistische Mittelwerte beliebiger, mit den betrachteten Teilchen korrespondierender, physikalischer Größen $Q(\mathbf{z}, t)$ bestimmen. Die Bestimmungsgleichung (kinetische Gleichung) für eine solche Verteilungsfunktion leitet sich ab aus dem Liouville-Theorem der statistischen Physik für den Fall schwach korrelierter Einzelteilchenzustände (wie es bei verdünnten Plasmen gegeben ist). Sie lautet:

$$\frac{d}{dt}f(\mathbf{z}, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_i \dot{z}_i \frac{\partial}{\partial z_i} \right) f(\mathbf{z}, t) = C f(\mathbf{z}, t) \quad . \quad (1.2)$$

C ist ein Wechselwirkungsoperator (Stoßoperator), der die Wechselwirkung der Teilchen untereinander beschreibt (elastische und inelastische Stöße etc.). In einem Plasma, das aus unterschiedlichen Teilchenspezies zusammengesetzt ist, muß für jede Spezies α eine Gleichung der Form

$$\frac{d}{dt}f_\alpha(\mathbf{z}, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_i \dot{z}_i \frac{\partial}{\partial z_i} \right) f_\alpha(\mathbf{z}, t) = \sum_\beta C_{\alpha\beta} f_\alpha(\mathbf{z}, t) \quad (1.3)$$

gelöst werden. Diese Gleichungen sind durch die Stoßoperatoren $C_{\alpha\beta}$ miteinander gekoppelt, die die Wechselwirkung der Teilchen α mit den Teilchen β beschreiben und Funktionen von f_α und f_β sind. Die konkrete Form der Stoßoperatoren hängt von der Art der Teilchen und dem physikalischen Modell für ihre Wechselwirkung untereinander ab. In Phasenraumkoordinaten ($\mathbf{z} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})$) lassen sich zwei verbreitete analytische Ausdrücke für die Stoßterme $C_{\alpha\beta}f_\alpha$ angeben, die sich aus unterschiedlichen Annahmen für die Stoßprozesse ableiten.

Der erste ist der sogenannte Boltzmann-Stoßterm:

$$C_{\alpha\beta}f_\alpha = N_\beta \int \int (f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta) \frac{d\sigma_{\alpha\beta}}{d\Omega} |\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta| d\mathbf{v}_\beta d\Omega \quad (1.4)$$

worin

$$\begin{aligned} f'_\alpha &= f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_\alpha, t) \quad ; \quad f_\alpha = f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha, t) \\ f'_\beta &= f_\beta(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_\beta, t) \quad ; \quad f_\beta = f_\beta(\mathbf{x}, \mathbf{v}_\beta, t) \end{aligned} \quad (1.5)$$

ist. $\mathbf{v}'$ bezeichnet eine Geschwindigkeit nach einem (Zweier-) Stoß, $\mathbf{v}$ eine Geschwindigkeit vor einem Stoß. $d\sigma_{\alpha\beta}/d\Omega$ ist der differentielle Streuquerschnitt für den betrachteten Stoßprozeß, $d\Omega$ der Raumwinkel und N_β die Gesamtzahl der Teilchen β .

Die Herleitung des Boltzmann-Stoßterms erfolgt unter der Voraussetzung, daß Zweierstöße mit Weitwinkelstreuung die dominierende Wechselwirkung zwischen den Teilchen ausmachen.

Ein zweiter geläufiger Ansatz für $C_{\alpha\beta}f_\alpha$ ist der sogenannte Fokker-Planck-Stoßterm:

$$C_{\alpha\beta}f_\alpha = - \sum_i \frac{\partial}{\partial v_{\alpha i}} [\{\Delta v_{\alpha i}\}_\beta f_\alpha] + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_{\alpha i} \partial v_{\alpha k}} [\{\Delta v_{\alpha i} \Delta v_{\alpha k}\}_\beta f_\alpha] \quad (1.6)$$

Darin bezeichnen $\{\Delta v_{\alpha i}\}_\beta$ die Drift- und $\{\Delta v_{\alpha i} \Delta v_{\alpha k}\}_\beta$ die Diffusionskoeffizienten. Sie beschreiben die Geschwindigkeitsänderungen der Teilchen α pro Zeiteinheit infolge von Stößen mit den Teilchen β . Mit $P_\beta(\mathbf{v}_\alpha, \Delta \mathbf{v}_\alpha, \Delta t)$ als der Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Teilchen α aufgrund der Stöße mit den Teilchen β seine Geschwindigkeit $\mathbf{v}_\alpha$ in der Zeit Δt um ein Inkrement $\Delta \mathbf{v}_\alpha$ ändert, läßt sich schreiben:

$$\begin{aligned} \{\Delta v_{\alpha i}\}_\beta &= \frac{1}{\Delta t} \int P_\beta(\mathbf{v}_\alpha, \Delta \mathbf{v}_\alpha, \Delta t) \Delta v_{\alpha i} d(\mathbf{v}_\alpha) \\ \{\Delta v_{\alpha i} \Delta v_{\alpha k}\}_\beta &= \frac{1}{\Delta t} \int P_\beta(\mathbf{v}_\alpha, \Delta \mathbf{v}_\alpha, \Delta t) \Delta v_{\alpha i} \Delta v_{\alpha k} d(\mathbf{v}_\alpha) \end{aligned} \quad (1.7)$$

Die Zeit Δt soll hierbei einerseits so lang sein, daß viele Stöße stattgefunden haben, aber andererseits so kurz, daß eine nur geringe Geschwindigkeitsänderung $\Delta \mathbf{v}_\alpha$ resultiert. Dies bedeutet also, daß ein Fokker-Planck-Stoßterm auch Vielteilchenstöße zu beschreiben vermag, jedoch nur für Kleinwinkelstreuungen gültig ist.

In der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich die Coulomb-Wechselwirkung als Stoßprozeß berücksichtigt. Beschränkt man sich dabei auf Zweierstöße und Kleinwinkelstreuung, so nehmen der Boltzmann- und der Fokker-Planck-Stoßterm (für Stöße mit mittleren Streuwinkeln) dieselbe Form an [1]:

$$\begin{aligned} C_{\alpha\beta}f_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) &= \\ &= -\Lambda \sum_i \frac{\partial}{\partial v_{\alpha i}} \left[\left(1 + \frac{m_\alpha}{m_\beta} \right) \frac{\partial \phi_\beta(\mathbf{v}_\alpha)}{\partial v_{\alpha i}} f_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) - \frac{1}{2} \sum_k \frac{\partial}{\partial v_{\alpha k}} \left(\frac{\partial^2 \psi_\beta(\mathbf{v}_\alpha)}{\partial v_{\alpha i} \partial v_{\alpha k}} f_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) \right) \right] \end{aligned} \quad (1.8)$$

Darin sind $\phi_\beta(\mathbf{v}_\alpha)$ und $\psi_\beta(\mathbf{v}_\alpha)$ – die Potentialfunktionen¹ – folgendermaßen definiert:

$$\psi_\beta(\mathbf{v}_\alpha) = \int |\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta| f_\beta(\mathbf{v}_\beta) d\mathbf{v}_\beta \quad (1.9)$$

$$\phi_\beta(\mathbf{v}_\alpha) = \int \frac{1}{|\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta|} f_\beta(\mathbf{v}_\beta) d\mathbf{v}_\beta . \quad (1.10)$$

In den konstanten Faktor Λ gehen die Ladungen $Z_\alpha e$ und $Z_\beta e$ der wechselwirkenden Teilchen, die Masse m_α und der Coulomb-Logarithmus λ ein.

$$\Lambda = \lambda \frac{Z_\alpha^2 Z_\beta^2 e^4}{4\pi \varepsilon_0^2 m_\alpha^2} \quad (1.11)$$

e bezeichnet die elektrische Elementarladung und ε_0 die elektrische Feldkonstante. Der Coulomb-Logarithmus ist gegeben durch

$$\lambda = \int_0^{b_{max}} \frac{b}{b_\perp^2 + b^2} db = \ln \left(\frac{\sqrt{b_{max}^2 + b_\perp^2}}{b_\perp} \right) \approx \ln \left(\frac{b_{max}}{b_\perp} \right) , \quad (1.12)$$

wobei b den Stoßparameter für den Zweierstoß bezeichnet. Der Coulomb-Logarithmus tritt auf, weil die Wechselwirkungsintegrale, die zur Herleitung des Ausdrucks (1.8) gelöst werden müssen, eine logarithmische Divergenz aufweisen, wenn der Stoßparameter b gegen Unendlich (der Streuwinkel gegen Null) geht. Dies hat seine Ursache in der unendlichen Reichweite der Coulomb-Wechselwirkung. Um diese Divergenz zu umgehen, muß ein maximaler Stoßparameter b_{max} (ein minimaler Streuwinkel) eingeführt werden, der üblicherweise in der Größenordnung des Debye-Radius gewählt wird (Abschirmeffekt). $b_\perp$ ist der Stoßparameter, der einem Streuwinkel von $\pi/2$ entspricht.

Die Koeffizienten $\{\Delta v_{\alpha i}\}_\beta$ und $\{\Delta v_{\alpha i} \Delta v_{\alpha k}\}_\beta$ sind somit durch

$$\{\Delta v_{\alpha i}\}_\beta = \left(1 + \frac{m_\alpha}{m_\beta} \right) \Lambda \frac{\partial \phi_\beta(\mathbf{v}_\alpha)}{\partial v_{\alpha i}} \quad (1.13)$$

$$\{\Delta v_{\alpha i} \Delta v_{\alpha k}\}_\beta = \Lambda \frac{\partial^2 \psi_\beta(\mathbf{v}_\alpha)}{\partial v_{\alpha i} \partial v_{\alpha k}} \quad (1.14)$$

¹Sie sind in [1] definiert durch:

$$\begin{aligned} \psi_\beta(\mathbf{v}_\alpha) &= -\frac{1}{8\pi} \int |\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta| f_\beta(\mathbf{v}_\beta) d\mathbf{v}_\beta \\ \phi_\beta(\mathbf{v}_\alpha) &= -\frac{1}{4\pi} \int \frac{1}{|\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta|} f_\beta(\mathbf{v}_\beta) d\mathbf{v}_\beta . \end{aligned}$$

gegeben, und es gilt die Beziehung

$$\begin{aligned}\{\Delta v_{\alpha i}\}_{\beta} &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}}\right) \sum_k \frac{\partial}{\partial v_{\alpha k}} \{\Delta v_{\alpha i} \Delta v_{\alpha k}\}_{\beta} \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}}\right) \sum_k \frac{\partial}{\partial v_{\alpha i}} \{\Delta v_{\alpha k} \Delta v_{\alpha k}\}_{\beta} .\end{aligned}\quad (1.15)$$

Definiert man

$$U_{ik} = \frac{\partial^2}{\partial v_{\alpha i} \partial v_{\alpha k}} |\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{v}_{\beta}| \quad (1.16)$$

und berücksichtigt, daß

$$\frac{\partial \phi_{\beta}(\mathbf{v}_{\alpha})}{\partial v_{\alpha i}} = \frac{1}{2} \sum_k \int U_{ik} \frac{\partial f_{\beta}(\mathbf{v}_{\beta})}{\partial v_{\beta k}} d\mathbf{v}_{\beta} \quad (1.17)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_{\beta}(\mathbf{v}_{\alpha})}{\partial v_{\alpha i} \partial v_{\alpha k}} = \int U_{ik} f_{\beta}(\mathbf{v}_{\beta}) d\mathbf{v}_{\beta} \quad (1.18)$$

gilt, so läßt sich (1.8) in der folgenden, als Landau-Integral bekannten, Form schreiben:

$$C_{\alpha\beta} f_{\alpha}(\mathbf{v}_{\alpha}) = -\frac{m_{\alpha}}{2} \Lambda \sum_i \frac{\partial}{\partial v_{\alpha i}} \sum_k \int U_{ik} \left[\frac{f_{\alpha}(\mathbf{v}_{\alpha})}{m_{\beta}} \frac{\partial f_{\beta}(\mathbf{v}_{\beta})}{\partial v_{\beta k}} - \frac{f_{\beta}(\mathbf{v}_{\beta})}{m_{\alpha}} \frac{\partial f_{\alpha}(\mathbf{v}_{\alpha})}{\partial v_{\alpha k}} \right] d\mathbf{v}_{\beta} \quad (1.19)$$

Für die weiteren Betrachtungen wird der Fokker-Planck-Stoßterm von Interesse sein. Das System der Integrodifferentialgleichungen für die Verteilungsfunktionen f_{α} lautet nun:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \dot{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \dot{\mathbf{v}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right) f_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) &= \\ &= -\Lambda \sum_{\beta} \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\left(1 + \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}}\right) \frac{\partial \phi_{\beta}(\mathbf{v})}{\partial v_i} - \frac{1}{2} \sum_k \frac{\partial}{\partial v_k} \frac{\partial^2 \psi_{\beta}(\mathbf{v})}{\partial v_i \partial v_k} \right] f_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)\end{aligned}\quad (1.20)$$

Diese Gleichungen bilden den Gegenstand zahlreicher Untersuchungen. Ihre Eigenschaften sind so vielfältig, daß bisher nur unter gewissen Annahmen Näherungslösungen gefunden werden konnten.

1.3 Eine Fokker-Planck-Gleichung für Testteilchen

Um die Gleichungen (1.20) praktisch nutzbar zu machen, ist es, wie bereits gesagt, notwendig, Vereinfachungen zu finden, die zwar die Allgemeinheit des Gleichungssystems (1.20) einschränken, doch weiterhin eine befriedigende Gültigkeit des theoretischen Modells in begrenzten Problemkreisen gewährleisten. Die vorliegende Arbeit befaßt sich vornehmlich mit der räumlichen Dichte- und Temperaturverteilung von Verunreinigungsionen in der Randschicht von Tokamak-Plasmen. In vielen praktisch interessierenden Fällen kann dabei angenommen werden, daß die Verunreinigungsteilchen eine nur kleine Störung im System eines Hintergrundplasmas (Deuteriumionen und Elektronen) darstellen. Diese Störung soll vernachlässigt werden. Für die Teilchen β ($\beta \neq \alpha$; α steht im weiteren für die Verunreinigungen) soll ein zeitlich stationäres lokales Gleichgewicht herrschen, d. h. die Verteilungsfunktionen seien Maxwellisch:

$$f_{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \left(\frac{m_{\beta}}{2\pi T_{\beta}(\mathbf{x})} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{m_{\beta}(\mathbf{v} - \mathbf{v}_{\beta}^0)^2}{T_{\beta}(\mathbf{x})} \right\} . \quad (1.21)$$

Hierin ist m_{β} die Masse der Teilchen β und $T_{\beta}(\mathbf{x})$ deren lokale Temperatur am Orte $\mathbf{x}$. $\mathbf{v}_{\beta}^0$ bezeichnet die lokale mittlere Geschwindigkeit der Teilchen β . Die Annahme der Nähe zu einem lokalen Gleichgewicht bedeutet eine physikalische Ähnlichkeit zwischen dem Teilchengas und einer strömenden Flüssigkeit. Diese Annahme bildet auch den Ausgangspunkt der fluidtheoretischen Beschreibung von Plasmen [2].

Die Verunreinigungsteilchen α sollen nun zwar nicht die Verteilung der Hintergrundteilchen β stören, jedoch selbst die „Wechselwirkung“ (Coulomb-Kräfte) mit dem Hintergrund spüren. Von vornherein soll die Wechselwirkung mit nur einer Teilchensorte (den schweren Hintergrundionen) berücksichtigt werden. Eine Wechselwirkung der Verunreinigungen untereinander wird auch aus der Untersuchung ausgespart (womit sich überhaupt erst eine in f_{α} lineare Gleichung für die Verteilungsfunktion f_{α} ergibt). Die so definierte Situation wird allgemein hin als Testteilchen-Modell bezeichnet.

Mit Hilfe der genannten Voraussetzungen gelangt man zur folgenden entkoppelten Gleichung für die Verunreinigungsteilchen α (siehe Kapitel 17 in [1]):

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \dot{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \dot{\mathbf{v}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right) f_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \\ & = \left(- \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\frac{w_i}{w} \{ \Delta w_{\parallel} \} \right] + \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \left[\frac{1}{2} \left(\delta_{ik} - \frac{w_i w_k}{w^2} \right) \{ \Delta w_{\perp}^2 \} + \frac{w_i w_k}{w^2} \{ \Delta w_{\parallel}^2 \} \right] \right) f_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \end{aligned} \quad (1.22)$$

Darin ist $\mathbf{w} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_{\beta}^0$. Die Koeffizienten $\{ \Delta w_{\parallel} \}$, $\{ \Delta w_{\parallel}^2 \}$ und $\{ \Delta w_{\perp}^2 \}$ sind die Komponenten des Driftvektors $\{ \Delta \mathbf{w} \}$ bzw. der Diffusionsmatrix $\{ \Delta \mathbf{w} \Delta \mathbf{w} \}$ in einem Koordinatensystem, in dem $\mathbf{v}_{\beta}^0 = 0$ ist und eine Achse parallel zur Relativgeschwindigkeit $\mathbf{v} - \mathbf{v}_{\beta}^0$ liegt².

In diesem System gilt (die $w_{\parallel}$ -Achse ist die parallele Achse):

$$\{ \Delta \mathbf{w} \} = \begin{pmatrix} \{ \Delta w_{\parallel} \} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad \{ \Delta \mathbf{w} \Delta \mathbf{w} \} = \begin{pmatrix} \{ \Delta w_{\parallel}^2 \} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \{ \Delta w_{\perp}^2 \} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \{ \Delta w_{\perp}^2 \} \end{pmatrix} . \quad (1.23)$$

Für die Koeffizienten in (1.23) erhält man

$$\{ \Delta w_{\parallel} \} = -w \left(1 + \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} \right) \frac{\mu(\chi)}{\tau_1^{\alpha\beta}} = -\frac{w}{\tau_s^{\alpha\beta}} \quad (1.24)$$

$$\{ \Delta w_{\parallel}^2 \} = w^2 \frac{\mu(\chi)}{\chi \tau_1^{\alpha\beta}} = \frac{w^2}{\tau_{\varepsilon}^{\alpha\beta}} \quad (1.25)$$

$$\{ \Delta w_{\perp}^2 \} = w^2 \frac{2 \left(\mu(\chi) + \mu'(\chi) - \frac{\mu(\chi)}{2\chi} \right)}{\tau_1^{\alpha\beta}} = \frac{w^2}{\tau_d^{\alpha\beta}} . \quad (1.26)$$

Hierin ist:

$$w = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_{\beta}^0| \quad (1.27)$$

$$\chi = w^2 \frac{m_{\beta}}{2T_{\beta}} \quad (1.28)$$

²In [1] werden die Koeffizienten mit $\langle \Delta v_{\parallel} \rangle$, $\langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle$ und $\langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle$ bezeichnet.

$$\mu(\chi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\chi e^{-t} \sqrt{t} dt \quad (1.29)$$

$$\mu'(\chi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-\chi} \sqrt{\chi} \quad (1.30)$$

$$\tau_1^{\alpha\beta} = \frac{w^3}{n_\beta \Lambda} \quad (1.31)$$

In den Gleichungen (1.24) – (1.26) sind die Koeffizienten noch unter Verwendung der sogenannten Spitzer-Zeiten (Relaxationszeiten) geschrieben worden. Es sind dies die Slowing-Down-Time τ_s , die Energy-Exchange-Time τ_e und die Deflection-Time τ_d .

Aus Gleichung (1.15) folgt ein Zusammenhang zwischen den Relaxationszeiten:

$$-\frac{1}{\tau_s} = \left(1 + \frac{m_\alpha}{m_\beta}\right) \frac{\partial}{\partial(w^2)} \left(\frac{w^2}{\tau_e} + \frac{w^2}{\tau_d} \right) \quad (1.32)$$

In Hinsicht auf die Anwendung von Resultaten aus der Theorie der stochastischen Prozesse, die im nächsten Kapitel erläutert werden, soll der Gültigkeitsbereich der Gleichung (1.22) noch etwas eingeschränkt werden, so daß eine Umformung von (1.22) auf die sogenannte Fokker-Planck-Form möglich ist.

Für die Zeitableitung von $\mathbf{v}$ wird gesetzt:

$$\dot{\mathbf{v}} = \frac{Z_\alpha e}{m_\alpha} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \frac{\mathbf{F}}{m_\alpha} \quad (1.33)$$

Der erste Term beinhaltet die Kraftwirkung äußerer elektromagnetischer Felder und der zweite eine vorläufig nicht näher spezifizierte Kraft $\mathbf{F}$, die aber die Forderung

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} = 0 \quad (1.34)$$

erfüllen soll.

In diesem Fall gilt (die Kennzeichnung α wird im weiteren weggelassen; nicht indizierte Größen stehen für die Verunreinigungen):

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \dot{\mathbf{x}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \dot{\mathbf{v}} \right) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \\
& = \left(- \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\frac{w_i}{w} \{ \Delta w_{\parallel} \} \right] + \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \left[\frac{1}{2} \left(\delta_{ik} - \frac{w_i w_k}{w^2} \right) \{ \Delta w_{\perp}^2 \} + \frac{w_i w_k}{w^2} \{ \Delta w_{\parallel}^2 \} \right] \right) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)
\end{aligned} \tag{1.35}$$

Hierbei wurde außerdem berücksichtigt, daß $\mathbf{x}$ und $\mathbf{v}$ unabhängige Variablen sind.

Diese Gleichung vom Fokker-Planck-Typ erlaubt prinzipiell die Anwendung von Monte-Carlo-Methoden (siehe Abschnitt 2.4) zu ihrer Lösung. Praktische Rechnungen, die auf dieser Gleichung fußen, werden in dieser Arbeit aber noch nicht vorgestellt, da die interessierenden Problemkreise (TEXTOR-Randschicht-Rechnungen) dann einen immensen zeitlichen Rechenaufwand mit sich brächten. Dies hat seine Ursache im zeitlich schnell fluktuierenden $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ -Term in Gleichung (1.33): die erwähnte Monte-Carlo-Methode beruht auf der numerischen Konstruktion einer statistisch repräsentativen Zahl von Teilchentrajektorien im Phasenraum für ein vorgegebenes Zeitintervall, und die schnelle Gyrationbewegung erfordert eine enorm hohe Zahl an Zeitschritten in der Simulation.

1.4 Eine Fokker-Planck-Gleichung für Testteilchen in driftkinetischen Variablen

Um den numerischen Rechenaufwand zu verringern, der mit der Komplexität der Teilchenbewegung (Gyrationbewegung um die $\mathbf{B}$ -Feldlinien), wie sie durch Gleichung (1.33) beschrieben wird, verbunden ist, soll in diesem Abschnitt ein Modell des Teilchentransports herangezogen werden, das allgemein als driftkinetische Näherung bekannt ist. Sie beinhaltet, daß einem geladenen Teilchen ein Guiding-Center-Vektor $\mathbf{R}$ zugeordnet wird, der einen mittleren Ortsvektor (näherungsweise der Gyrationmittelpunkt) des Teilchens darstellt. Weiterhin wird das Teilchen durch eine mittlere Geschwindigkeit $v_{\parallel}$ parallel zum Magnetfeld und einen mittleren Geschwindigkeitsbetrag $v_{\perp}$ senkrecht zum Magnetfeld charakterisiert (die Mittelung bezieht sich auf den Gyrationswinkel).

Die nachfolgenden Ausdrücke für die Zeitableitungen $\dot{\mathbf{R}}$, $\dot{v}_{\parallel}$ und $\dot{v}_{\perp}$ sollen ohne weitere Erläuterung angegeben werden. Sie ergeben sich aus den in [3] abgeleite-

ten Ausdrücken für den Fall $\text{rot } \mathbf{B} = 0$ und $\dot{\mathbf{B}} = 0$ (eine für Tokamak-Plasmen meist akzeptable Näherung).

$$\dot{\mathbf{R}} = v_{\parallel} \mathbf{b} + \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} + \frac{mv_{\perp}^2}{2ZeB} \text{rot} \mathbf{b} + \frac{mv_{\parallel}^2}{ZeB} \text{rot} \mathbf{b} \quad (1.36)$$

$$\dot{v}_{\parallel} = \frac{Ze}{m} \mathbf{E} \mathbf{b} + \frac{1}{2} v_{\perp}^2 \text{div} \mathbf{b} + Z \frac{v_{\parallel}}{B} \mathbf{E} \text{rot} \mathbf{b} \quad (1.37)$$

$$\dot{v}_{\perp} = -\frac{1}{2} v_{\parallel} v_{\perp} \text{div} \mathbf{b} + \frac{1}{2} Z \frac{v_{\perp}}{B} \mathbf{E} \text{rot} \mathbf{b} \quad (1.38)$$

In diesen Gleichungen ist $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$ der Einheitsvektor in Richtung des Magnetfeldes.

Selbst in dieser verkürzten Form bereiten die Zeitableitungen $\dot{\mathbf{R}}$, $\dot{v}_{\parallel}$ und $\dot{v}_{\perp}$ aber Probleme beim Aufstellen einer zu (1.35) analogen Fokker-Planck-Gleichung in den driftkinetischen Variablen, denn für die totale Zeitableitung d/dt gilt in diesen Variablen

$$\frac{d}{dt} = \dot{\mathbf{R}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \dot{v}_{\parallel} \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} + \dot{v}_{\perp} \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} \neq \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \dot{\mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \dot{v}_{\parallel} + \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} \dot{v}_{\perp} \quad (1.39)$$

Um diese Schwierigkeit (in Hinblick auf die numerische Methode) vorläufig zu umgehen, soll die Einschränkung $\mathbf{E} = \text{const.}$ und $\mathbf{B} = \text{const.}$ gemacht werden³. Die Zeitableitungen der driftkinetischen Variablen werden damit zu:

$$\dot{\mathbf{R}} = v_{\parallel} \mathbf{b} + \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \quad (1.40)$$

$$\dot{v}_{\parallel} = \frac{Ze}{m} \mathbf{E} \mathbf{b} \quad (1.41)$$

$$\dot{v}_{\perp} = 0 \quad (1.42)$$

Der Stoßoperator in Gleichung (1.35) läßt sich für den allgemeinen Fall einer beliebigen mittleren Geschwindigkeit $\mathbf{v}_{\beta}^0$ nicht in den driftkinetischen Variablen $v_{\parallel}$ und $v_{\perp}$ allein darstellen; er weist zudem eine Abhängigkeit vom Gyrationwinkel φ auf. Es ist aber zu beachten, daß der Stoßoperator invariant gegenüber Änderungen des Gyrationwinkels φ ist, wenn $\mathbf{v}_{\beta}^0 \parallel \mathbf{b}$ gewählt wird (was in den praktisch interessierenden Fällen weitgehend erfüllt ist).

³Eine Verallgemeinerung soll in einer späteren Arbeit diskutiert werden. Hier geht es primär um die Exaktheit des Monte-Carlo-Kalküls für lineare Fokker-Planck-Gleichungen.

Unter Verwendung der folgenden Transformation

$$v_1 = v_{\parallel}$$

$$v_2 = v_{\perp} \cos \varphi$$

$$v_3 = v_{\perp} \sin \varphi$$

$$\frac{\partial}{\partial v_1} = \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \tag{1.43}$$

$$\frac{\partial}{\partial v_2} = -\frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{1}{v_{\perp}} \sin \varphi + \frac{1}{v_{\perp}} \cos \varphi + \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} \cos \varphi$$

$$\frac{\partial}{\partial v_3} = \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{1}{v_{\perp}} \cos \varphi + \frac{1}{v_{\perp}} \sin \varphi + \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} \sin \varphi$$

erhält man:

$$\begin{aligned}
C &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \{\Delta v_i\} + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \{\Delta v_i \Delta v_k\} = \\
&= - \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\frac{w_i}{w} \{\Delta w_{\parallel}\} \right] + \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \left[\frac{1}{2} \left(\delta_{ik} - \frac{w_i w_k}{w^2} \right) \{\Delta w_{\perp}^2\} + \frac{w_i w_k}{w^2} \{\Delta w_{\parallel}^2\} \right] \\
&= - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \frac{w_{\parallel}}{w} \{\Delta w_{\parallel}\} - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} \frac{w_{\perp}}{w} \{\Delta w_{\parallel}\} - \frac{1}{w} \{\Delta w_{\parallel}\} + \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel}^2} \left(\frac{1}{2} \frac{w_{\perp}^2}{w^2} \{\Delta w_{\perp}^2\} + \frac{w_{\parallel}^2}{w^2} \{\Delta w_{\parallel}^2\} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp}^2} \left(\frac{1}{2} \frac{w_{\parallel}^2}{w^2} \{\Delta w_{\perp}^2\} + \frac{w_{\perp}^2}{w^2} \{\Delta w_{\parallel}^2\} \right) + \\
&\quad - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel} \partial v_{\perp}} + \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp} \partial v_{\parallel}} \right) \left(\frac{1}{2} \frac{w_{\parallel} w_{\perp}}{w^2} \{\Delta w_{\perp}^2\} - \frac{w_{\parallel} w_{\perp}}{w^2} \{\Delta w_{\parallel}^2\} \right) + \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{1}{w_{\perp}} \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} \left(\frac{1}{2} \left(1 - 2 \frac{w_{\perp}^2}{w^2} \right) \{\Delta w_{\perp}^2\} + 2 \frac{w_{\perp}^2}{w^2} \{\Delta w_{\parallel}^2\} \right) + \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left(2 \frac{w_{\parallel}}{w^2} \{\Delta w_{\parallel}^2\} - \frac{w_{\parallel}}{w^2} \{\Delta w_{\perp}^2\} \right) + \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \frac{1}{w_{\perp}^2} \{\Delta w_{\perp}^2\}
\end{aligned} \tag{1.44}$$

Es ist erkennbar, daß der Stoßterm $C f(v_{\parallel}, v_{\perp}, \varphi)$ für jeden Winkel φ denselben Wert annimmt, wenn $f(v_{\parallel}, v_{\perp}, \varphi)$ invariant gegenüber Drehungen um $\mathbf{b}$ ist, d. h. , wenn $\partial f(v_{\parallel}, v_{\perp}, \varphi) / \partial \varphi = 0$ gilt. Schränkt man die möglichen Lösungen $f(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t)$ der kinetischen Gleichung auf diese Art Funktionen $f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t)$ ein, so erhält man einen Stoßterm in driftkinetischen Variablen. Dieser Stoßterm fügt sich aber nicht in die Zielsetzung, eine kinetische Gleichung vom Fokker-Planck-Typ aufzustellen. Vielmehr ist es wünschenswert, eine Form des Stoßoperators wie auf der linken Seite von (1.44) zu bewahren, um die numerischen Methoden des nächsten Kapitels anwenden zu können. Die Symmetrie des Stoßoperators läßt sich aber ausnutzen, indem man die Verteilungsfunktion $f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t)$ in einem dreidimensionalen Hilfskoordinatensystem betrachtet (das durch Hinzunahme eines beliebigen (!) Winkels φ konstruiert wird), und fordert, daß $f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, \varphi, t)$ unabhängig von φ ist. In diesem Sinne sind die Koordinaten v_1, v_2 und v_3 in der folgenden Darstellung zu verstehen.

$$\begin{aligned}
C f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t) = \\
= \left(- \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \{ \Delta v_i \} + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \{ \Delta v_i \Delta v_k \} \right) f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t)
\end{aligned} \tag{1.45}$$

Das Hilfskoordinatensystem kann z. B. immer so gewählt werden, daß $v_{\parallel} = v_1$ und $v_{\perp} = \sqrt{v_2^2 + v_3^2}$ ist.

Zusammengefaßt ist es also so, daß die Übertragung des Stoßterms auf die driftkinetische Näherung in der Annahme $\mathbf{v}_{\beta}^0 \parallel \mathbf{b}$ und der Beschränkung der Lösungen $f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, \varphi, t)$ im dreidimensionalen Geschwindigkeitsraum auf die symmetrischen Funktionen $f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t)$ besteht. Die obige Form (1.45) des Stoßterms bietet nun die Möglichkeit der Anwendung von Monte-Carlo-Methoden (siehe Abschnitt 2.4.3) und die zu (1.35) analoge Gleichung⁴ lautet damit:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \dot{\mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \dot{v}_{\parallel} \right) f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t) = \\
= \left(- \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\frac{w_i}{w} \{ \Delta w_{\parallel} \} \right] + \right. \\
\left. + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \left[\frac{1}{2} \left(\delta_{ik} - \frac{w_i w_k}{w^2} \right) \{ \Delta w_{\perp}^2 \} + \frac{w_i w_k}{w^2} \{ \Delta w_{\parallel}^2 \} \right] \right) f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t)
\end{aligned} \tag{1.46}$$

Um diese Gleichung nun noch etwas an die experimentelle Erfahrung (in Tokamak-Plasmen) anzupassen, soll zusätzlich eine empirische radiale Diffusion im Ortsraum als Näherung für den sogenannten anomalen Transport einbezogen werden. Dies geschieht durch einen Term der Form

$$\frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial R_k} \hat{r}_i \hat{r}_k D_{\perp} \tag{1.47}$$

mit $\hat{\mathbf{r}}$ als Einheitsvektor in radialer Richtung und einem Diffusionskoeffizienten $D_{\perp}$. $D_{\perp}$ wird dabei oft als Konstante angenommen, oder entsprechend dem Alcator-Scaling als umgekehrt proportional zur Plasmadichte ($D_{\perp} = 5.0 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-1} \text{ s}^{-1} / n_e$ mit $n_e \equiv$ Elektronendichte).

⁴Driftkinetische Gleichungen, die auf anderen, oft weniger einschränkenden, Annahmen beruhen, sind zum Beispiel in [4],[5] und [6] zu finden.

Die nachfolgende Gleichung bildet den Ausgangspunkt für die numerischen Anwendungen in dieser Arbeit:

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \dot{\mathbf{R}} - \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial R_k} \hat{r}_i \hat{r}_k D_{\perp} + \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \dot{v}_{\parallel} \right) f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t) = \\
& = \left(- \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\frac{w_i}{w} \{ \Delta w_{\parallel} \} \right] + \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \left[\frac{1}{2} \left(\delta_{ik} - \frac{w_i w_k}{w^2} \right) \{ \Delta w_{\perp}^2 \} + \frac{w_i w_k}{w^2} \{ \Delta w_{\parallel}^2 \} \right] \right) f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t)
\end{aligned} \tag{1.48}$$

Kapitel 2

Teilchentransport und Diffusionsprozesse

2.1 Vorbemerkungen

In diesem Abschnitt sollen Fokker-Planck-Gleichungen, die sich oben als spezielle kinetische Gleichungen (siehe (1.35) und (1.48)) ergaben, im Rahmen der Theorie stochastischer Prozesse betrachtet werden. Es wird sich zeigen, daß sie als Grundgleichungen spezieller Markovscher Prozesse, den Diffusionsprozessen, anzusehen sind. Die Beziehung von Diffusionsprozessen und stochastischen Differentialgleichungen wird einen einfachen und effizienten Monte-Carlo-Algorithmus zur Lösung von Fokker-Planck-Gleichungen liefern. Die numerische Methode wird anschließend anhand einiger Beispiele illustriert.

2.2 Die Chapman-Kolmogorov-Differentialgleichung für Markov-Prozesse

Ohne eine tiefergehende Erörterung der mathematischen Details sollen in diesem Abschnitt einige Grundtatsachen der Theorie der Markovschen Prozesse aufgeführt werden. Die Darstellung orientiert sich dabei weitgehend an den Ausführungen in [7] und der dort gewählten Notation.

Als stochastischer Prozeß soll ein System bezeichnet werden, welches durch eine bestimmte zeitabhängige Zufallsvariable $\mathbf{X}(t)$ (Zufallsvektor) charakterisiert wird. Diese Zufallsvariable kann die möglichen Werte $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots$ etc. zu den Zeitpunkten $t_1, t_2, t_3, \dots$ annehmen und es wird angenommen, daß ein Satz von Wahrscheinlichkeitsdichten existiert

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \dots) \quad , \quad (2.1)$$

der das System vollständig beschreibt. Weiterhin können noch bedingte Wahrscheinlichkeitsdichten definiert werden durch

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, t'_1; \mathbf{y}_2, t'_2; \dots) = \\ = p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots; \mathbf{y}_1, t'_1; \mathbf{y}_2, t'_2; \dots) / p(\mathbf{y}_1, t'_1; \mathbf{y}_2, t'_2; \dots) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Hierin soll als Konvention die Zeitordnung

$$t_1 \geq t_2 \geq t_3 \geq \dots \geq t'_1 \geq t'_2 \geq \dots \quad (2.3)$$

gelten.

Ein Markov-Prozeß wird nun über bedingte Wahrscheinlichkeiten definiert. Für ihn soll gelten:

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, t'_1; \mathbf{y}_2, t'_2; \dots) = p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, t'_1) \quad (2.4)$$

Gemäß oben eingeführter Zeitordnung bedeutet dies, daß die von vorhergehenden Ereignissen bedingte Entwicklung des stochastischen Prozesses zu den Zeitpunkten $t_1, t_2, \dots$ nur vom jüngsten Ereignis zur Zeit t'_1 abhängt. Die Markov-Annahme (2.4) läßt es zu, daß eine beliebige Wahrscheinlichkeitsdichte der Form (2.1) durch ein Produkt einfacher bedingter Wahrscheinlichkeiten ausgedrückt werden kann.

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \dots; \mathbf{x}_n, t_n) = \\ = p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) \dots p(\mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1} | \mathbf{x}_n, t_n) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Die beiden folgenden Gleichungen besitzen allgemeine Gültigkeit für alle stochastischen Prozesse:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, t_1) &= \int p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2) d\mathbf{x}_2 \\ &= \int p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2) d\mathbf{x}_2 \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) &= \int p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) d\mathbf{x}_3 \\ &= \int p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3) p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) d\mathbf{x}_3 \end{aligned} \quad (2.7)$$

Verwendet man in der zweiten Gleichung (2.7) die Markov-Annahme (2.4), so ergibt sich die Integralform der Chapman-Kolmogorov-Gleichung

$$p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_3, t_3) = \int p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) d\mathbf{x}_2 \quad (2.8)$$

Diese Chapman-Kolmogorov-Gleichung kann unter gewissen Bedingungen zu einer Differentialgleichung umgeformt werden, und zwar soll für die nachfolgenden Grenzprozesse für alle $\varepsilon > 0$ gelten:

(i)

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) = W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t)$$

gleichmäßig in $\mathbf{x}$, $\mathbf{z}$ und t für $|\mathbf{x} - \mathbf{z}| \geq \varepsilon$;

(ii)

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{z}| < \varepsilon} (x_i - z_i) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) d\mathbf{x} = A_i(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon)$$

gleichmäßig in $\mathbf{z}$, ε und t ;

(iii)

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{z}| < \varepsilon} (x_i - z_i)(x_k - z_k) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) d\mathbf{x} = D_{ik}(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon)$$

gleichmäßig in $\mathbf{z}$, ε und t .

Sind diese Bedingungen erfüllt, so läßt sich zeigen (siehe [7]), daß die Chapman-Kolmogorov-Differentialgleichung gilt :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_k} [D_{ik}(\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] \\ &+ \int [W(\mathbf{z} | \mathbf{x}, t) p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t') - W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] \end{aligned} \quad (2.9)$$

Je nach Art der Koeffizienten folgen hieraus verschiedene Grundgleichungen stochastischer Prozesse, und zwar die Master-Gleichung ($A_i = 0$; $D_{ik} = 0$), die Sprungprozesse beschreibt, die Fokker-Planck-Gleichung ($W = 0$), die Diffusionsprozesse beschreibt, und die Liouville-Gleichung ($W = 0$; $D_{ik} = 0$) für deterministische Prozesse.

2.3 Fokker-Planck-Gleichung und stochastische Differentialgleichung

Für $W = 0$ wird die Chapman-Kolmogorov-Differentialgleichung (2.9) zur Fokker-Planck-Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_k} [D_{ik}(\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] \end{aligned} \quad (2.10)$$

Der Vektor $\mathbf{A}(\mathbf{z}, t)$ wird Driftvektor und die (positiv semidefinite und symmetrische) Matrix $\mathbf{D}(\mathbf{z}, t)$ wird Diffusionsmatrix genannt. Den zugehörigen stochastischen Prozeß bezeichnet man als Diffusionsprozeß. Er kann folgendermaßen veranschaulicht werden: Unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung

$$p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t) = \delta(\mathbf{z} - \mathbf{y}) \quad (2.11)$$

erhält man für die bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\mathbf{z}, t + \Delta t | \mathbf{y}, t)$ für ein kleines Zeitintervall Δt [8]:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z}, t + \Delta t | \mathbf{y}, t) &= (2\pi)^{-N/2} (\det[\mathbf{D}(\mathbf{y}, t)])^{-1/2} (\Delta t)^{-1/2} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{[\mathbf{z} - \mathbf{y} - \mathbf{A}(\mathbf{z}, t)\Delta t]^T [\mathbf{D}(\mathbf{y}, t)]^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{y} - \mathbf{A}(\mathbf{z}, t)\Delta t]}{\Delta t} \right\} \end{aligned} \quad (2.12)$$

(N ist die Dimension des Zufallsvektors $\mathbf{X}(t)$.)

Die Übergangswahrscheinlichkeitsdichte ist also durch eine Gauß-Verteilung mit Kovarianzmatrix $\mathbf{D}(\mathbf{y}, t)$ und Mittelwert $\mathbf{y} + \mathbf{A}(\mathbf{y}, t)\Delta t$ gegeben. Dies bedeutet, daß sich die Änderung der Zufallsvariablen $\mathbf{X}(t)$ in der Zeit Δt zusammensetzt aus einer systematischen Drift mit Geschwindigkeit $\mathbf{A}(\mathbf{y}, t)$ und einer Gaußschen Fluktuation mit Kovarianz $\mathbf{D}(\mathbf{y}, t)\Delta t$. Dies kann auch geschrieben werden als:

$$\mathbf{y}(t + \Delta t) = \mathbf{y}(t) + \mathbf{A}(\mathbf{y}(t), t)\Delta t + \boldsymbol{\eta}(t)(\Delta t)^{1/2} \quad (2.13)$$

$\boldsymbol{\eta}(t)$ ist ein stochastischer Term mit Mittelwert $\mathbf{0}$ und Kovarianz $\mathbf{D}(\mathbf{y}, t)$.

Die Untersuchung einer solchen stochastischen Bewegung, die sich durch den diffusiven Anteil $\boldsymbol{\eta}(t)(\Delta t)^{1/2}$ auszeichnet, führte zum Konzept der stochastischen Differentialgleichungen und der stochastischen Integration. Die Entwicklung der zugehörigen Theorie kann auf unterschiedliche Weise erfolgen, zumeist kommt das von Ito [9] vorgeschlagene Kalkül zur Anwendung.

Die stochastische Differentialgleichung für ein System, das sich gemäß Gleichung (2.13) entwickelt, wird definiert durch:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) dt + \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{W}(t) \quad (2.14)$$

Darin ist $d\mathbf{W}(t)$ das Inkrement eines N -dimensionalen Wiener-Prozesses. Der Wiener-Prozeß ergibt sich als Lösung der Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{w}, t | \mathbf{w}_0, t_0) = \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial w_i^2} p(\mathbf{w}, t | \mathbf{w}_0, t_0) \quad (2.15)$$

Es kann nun gezeigt werden, daß die stochastische Differentialgleichung (mit der Anfangsbedingung $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ für $t = t_0$) in äquivalenter Weise denselben stochastischen Prozeß beschreibt wie die Fokker-Planck-Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) = & - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} [A_i(\mathbf{x}, t) p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \left[\left(\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \mathbf{B}^T(\mathbf{x}, t) \right)_{ik} p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \right] \end{aligned} \quad (2.16)$$

Dies ist so zu verstehen, daß die Trajektorien der Zufallsgröße $\mathbf{X}(t)$, wenn sie sich gemäß der stochastischen Differentialgleichung (2.14) in der Zeit entwickeln, zu einer Verteilung der Werte $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$ führen, die der Lösung $p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$ von Gleichung (2.16) entspricht und umgekehrt.

2.4 Die Monte-Carlo-Methode zur Lösung der Fokker-Planck-Gleichung

Das oben gesagte über den Zusammenhang zwischen den Trajektorien eines stochastischen Prozesses, die durch stochastische Differentialgleichungen beschrieben werden, und der zugehörigen Fokker-Planck-Gleichung legt es nahe, die numerische Konstruktion von Trajektorien zur näherungsweisen Lösung einer Fokker-Planck-Gleichung zu nutzen. Dies ist insbesondere deshalb von Interesse, da die in Kapitel 1 abgeleiteten kinetischen Gleichungen (1.35) und (1.48) vom gleichen Typ wie (2.14) sind (Man hat sich die Verteilungsfunktion $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ in (1.35) oder (1.48) als bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t | \mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, t_0)$ mit sicherem Startereignis $(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, t_0)$ vorzustellen). Eine solcher Lösungsalgorithmus ist mit einem Computer einfach zu realisieren: Man bedient sich einer statistisch repräsentativen Zahl von Simulationsteilchen und ändert ihre Koordinaten $\mathbf{x}$ in diskreten Schritten

$$\Delta \mathbf{x} = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \Delta t + \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \Delta \mathbf{W} \quad . \quad (2.17)$$

Diese Konstruktion wird solange mit genügend kleinem Zeitschritt Δt durchgeführt, bis ein interessierender Zeitpunkt t erreicht ist. Der zugrundeliegende Konfigurationsraum für die Zufallsvariable $\mathbf{X}(t)$ wird in ein feines Netz unterteilt und ein abschließendes Durchzählen der Simulationsteilchen in diesem Netz liefert (nach geeigneter Normierung) eine Näherung für die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$.

Die praktische Realisierung eines Inkrements ΔW wird erreicht durch

$$\Delta W = (\Delta t)^{1/2} \gamma_G \quad , \quad (2.18)$$

wobei γ_G eine gaußverteilte Zufallszahl mit Mittelwert 0 und Varianz 1 bezeichnet.

Die numerische (Monte-Carlo-) Methode soll an dieser Stelle anhand von analytisch lösbaren Problemen illustriert werden. Es sind dies der eindimensionale Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß und die Kramer-Gleichung, die beide als einfache Modelle für die Brownsche Bewegung dienen, und kinetische Gleichungen der Art (1.35) und (1.48), in denen nur Coulomb-Stöße berücksichtigt werden.

2.4.1 Beispiel 1: Der Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß

Als Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß bezeichnet man einen stochastischen Prozeß, der durch die Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} [K x p(x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D p(x, t)] \quad (2.19)$$

beschrieben wird. $p(x, t)$ steht für $p(x, t | x_0, t_0)$ und die Koeffizienten K und D sind Konstanten. Für die Anfangsbedingung

$$p(x, t = 0) = \delta(x) \quad (2.20)$$

lautet die Lösung

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2\sigma^2(t)} \right\} \quad (2.21)$$

mit

$$\sigma^2(t) = \frac{D}{2K} (1 - \exp\{-2Kt\}) \quad . \quad (2.22)$$

Dies ist eine Gaußverteilung mit Mittelwert 0 und zeitlich veränderlicher Varianz $\sigma^2(t)$. Für $t \rightarrow \infty$ strebt $p(x, t)$ gegen die stationäre Lösung $p_s(x)$.

$$p_s(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi D/K}} \exp \left\{ -\frac{K x^2}{D} \right\} \quad (2.23)$$

Die Gleichung (2.19) wurde mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode gelöst und das Ergebnis mit dem analytischen Ausdruck (2.21) verglichen. Verwendet wurden die Parameter $K = 6.5 \cdot 10^2$ und $D = 9.5 \cdot 10^{11}$ und ein Zeitschritt von $\Delta t = 1.0 \cdot 10^{-5}$. Die stochastische Differenzengleichung in der Simulation lautete

$$\Delta x = -Kx \Delta t + \sqrt{D} \Delta W \quad . \quad (2.24)$$

Die Abbildungen Abb.1 bis Abb.9 zeigen die berechneten Verteilungsfunktionen (Wahrscheinlichkeitsdichten) $p(x, t)$ für drei verschiedene Zeiten t . Zum Test des Rechenaufwandes wurden jeweils drei verschiedene Teilchenzahlen in der Simulation verwendet. Zusätzlich zu den berechneten Verteilungsfunktionen (durchgezogene Linien) wurden zwei Gauß-Kurven eingezeichnet, von denen die eine die analytische Lösung (2.21) darstellt und die andere einen Mittelwert und eine Varianz besitzt, die durch Integration der berechneten Verteilungsfunktion ermittelt wurden. Diese angepaßte Gauß-Kurve dient dazu, die Genauigkeit der Mittelwerte

$$\langle x(t) \rangle = \int x p(x, t) dx \quad (2.25)$$

$$(2.26)$$

$$\langle x'^2(t) \rangle = \int (x - \langle x(t) \rangle)^2 p(x, t) dx = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \quad (2.27)$$

wie sie sich aus der Simulation ergeben, zu überprüfen.

Die Abbildungen zeigen für die berechneten Verteilungsfunktionen einen sehr unregelmäßigen Verlauf, der aber mit steigender Teilchenzahl in der Simulation glatter wird und sich der analytischen Gauß-Kurve annähert. Die angepaßte und die analytische Gauß-Kurve liegen für alle Teilchenzahlen sehr nah beieinander und können, insbesondere für hohe Teilchenzahlen, nicht mehr unterschieden werden. Dies zeigt, daß auch die stark unregelmäßigen Verteilungsfunktionen der Monte-Carlo-Rechnung bereits zu guten Resultaten für die integrierten Größen führen.

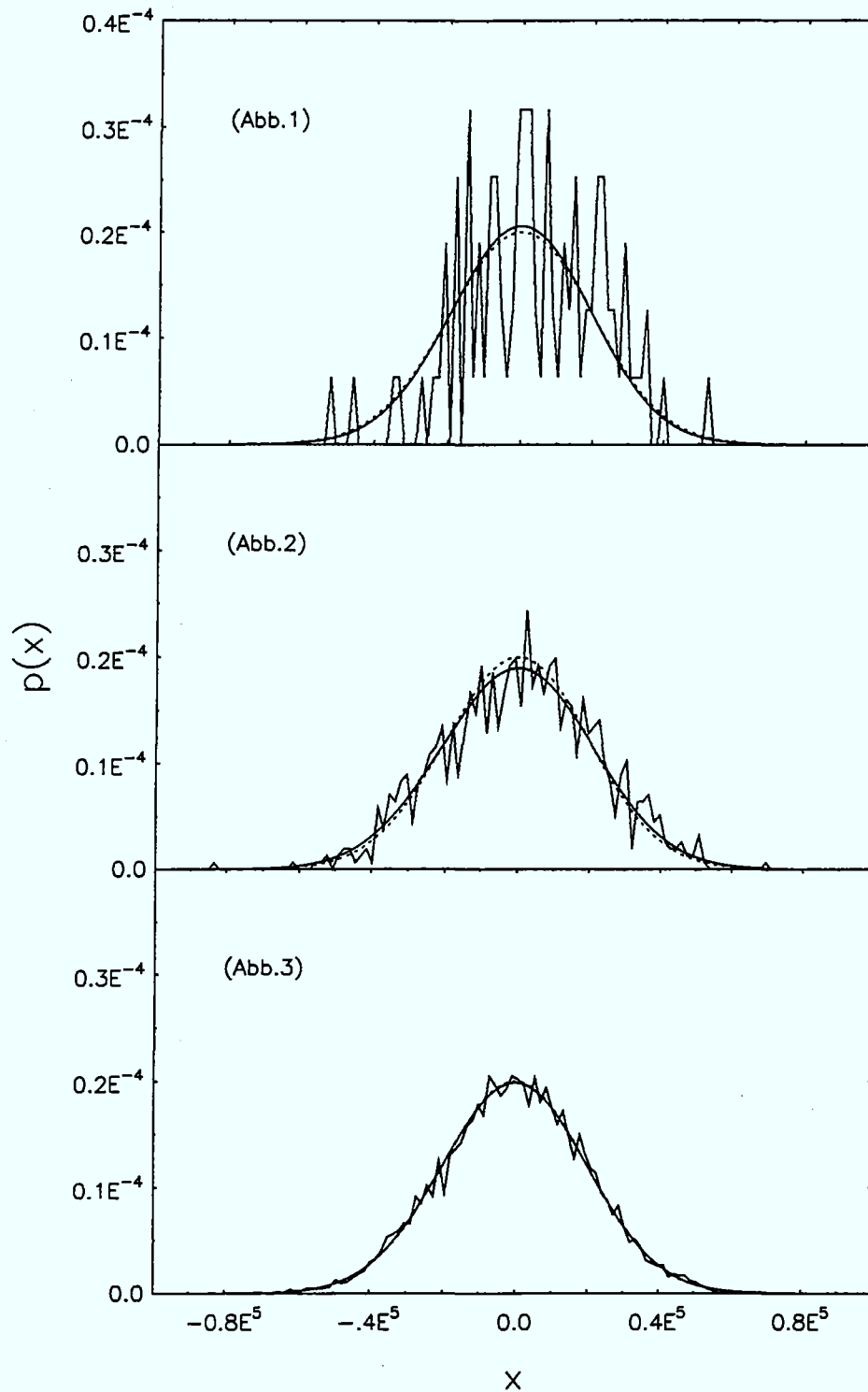


Abbildung 2.1: Ergebnisse der Monte-Carlo-Rechnungen zum O.-U.-Prozeß (2.19) für $t = 6 \cdot 10^{-4}$. Die durchgezogenen Linien stellen die berechnete Verteilungsfunktion und die angepaßte Gauß-Funktion dar, die punktierte die analytische Gauß-Funktion. In der Simulation wurden 100 (oben), 1000 (mitte) und 10000 (unten) Teilchen verwendet.

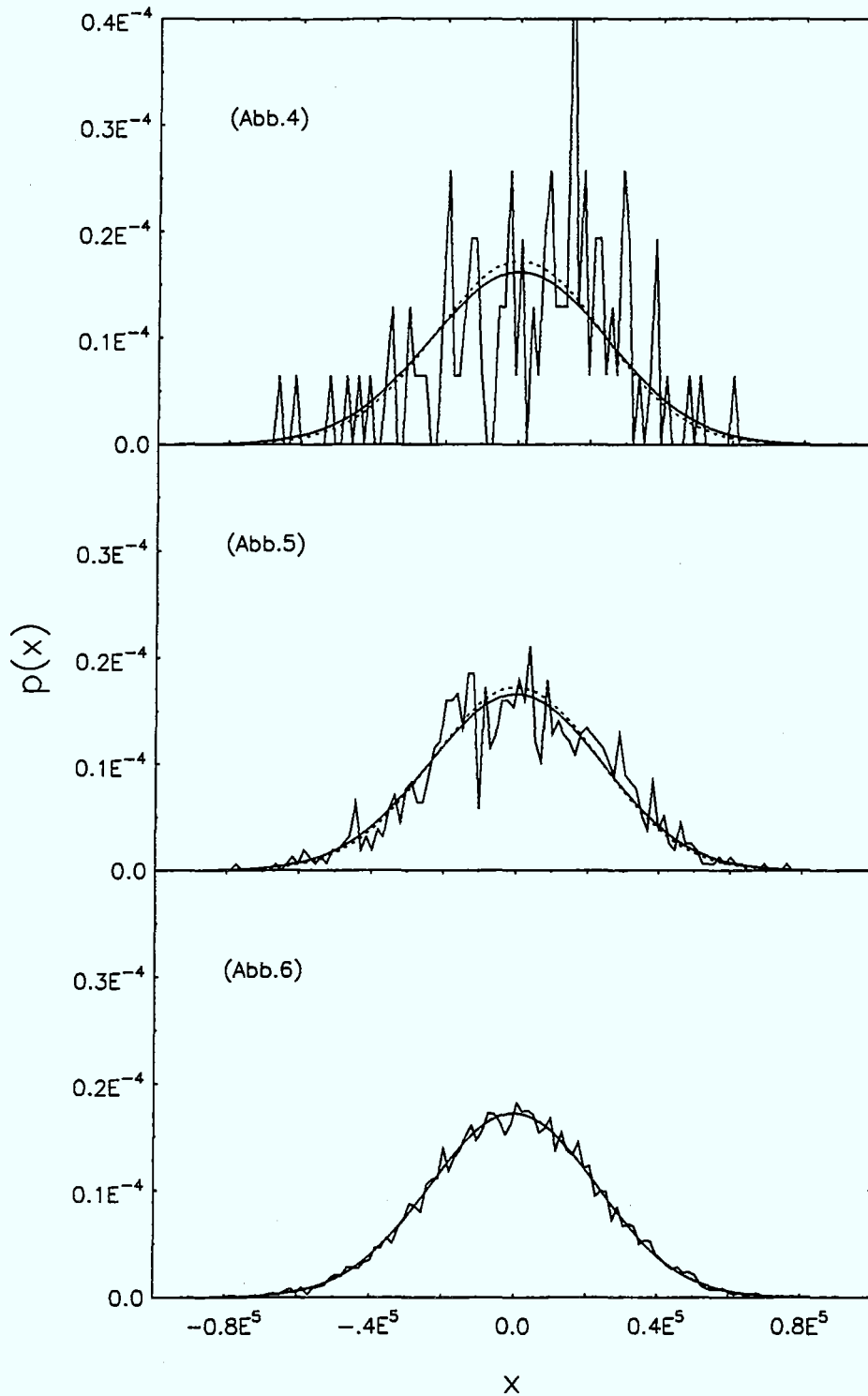


Abbildung 2.2: Ergebnisse der Monte-Carlo-Rechnungen zum O.-U.-Prozeß (2.19) für $t = 1 \cdot 10^{-3}$. Die durchgezogenen Linien stellen die berechnete Verteilungsfunktion und die angepaßte Gauß-Funktion dar, die punktierte die analytische Gauß-Funktion. In der Simulation wurden 100 (oben), 1000 (mitte) und 10000 (unten) Teilchen verwendet.

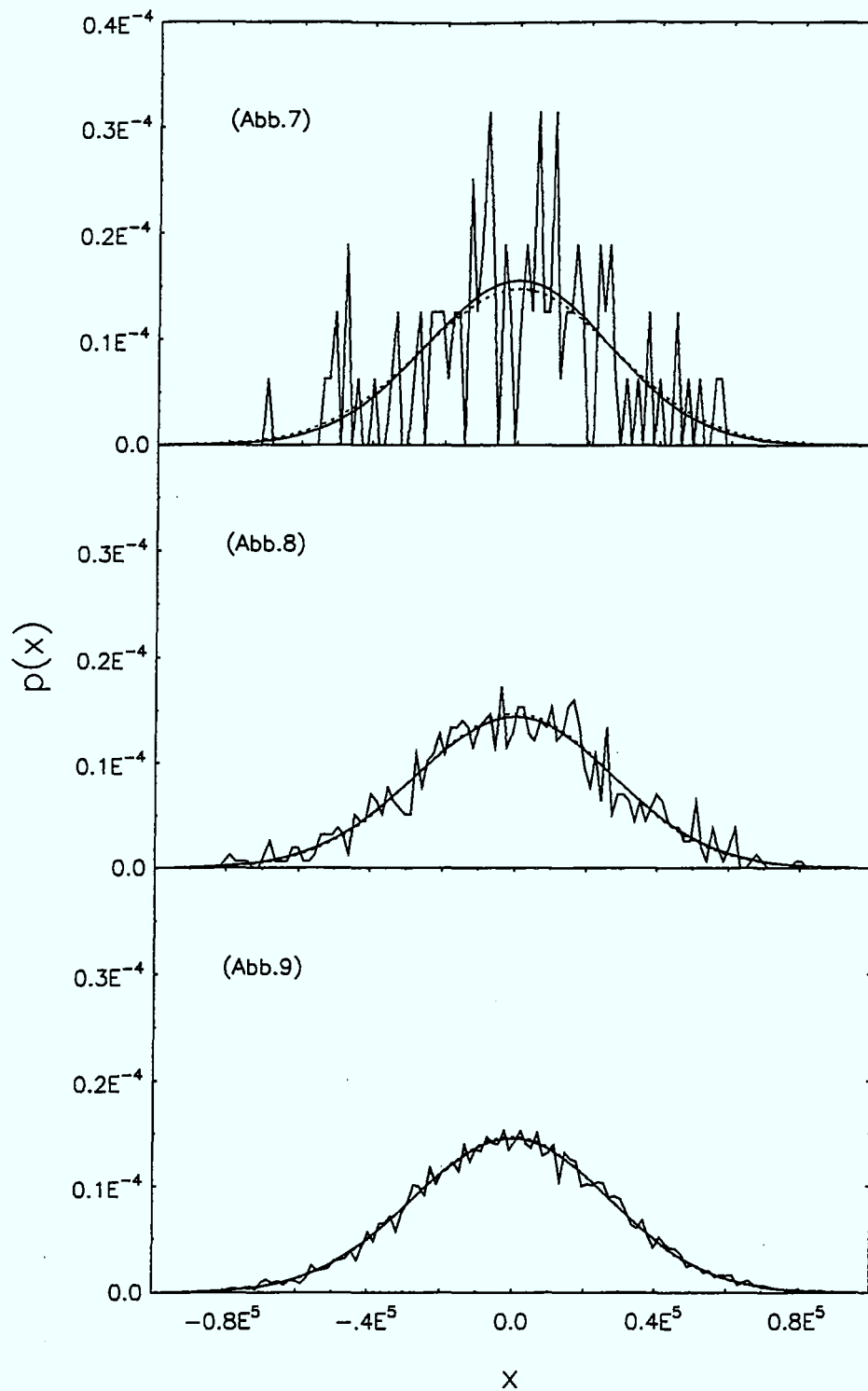


Abbildung 2.3: Ergebnisse der Monte-Carlo-Rechnungen zum O.-U.-Prozeß (2.19) für $t = 1 \cdot 10^{-2}$. Die durchgezogenen Linien stellen die berechnete Verteilungsfunktion und die angepaßte Gauß-Funktion dar, die punktierte die analytische Gauß-Funktion. In der Simulation wurden 100 (oben), 1000 (mitte) und 10000 (unten) Teilchen verwendet.

2.4.2 Beispiel 2: Die Kramer-Gleichung

Die Kramer-Gleichung beschreibt die Brownsche Bewegung unter Einwirkung einer äußeren Kraft infolge eines Potentials $V(x)$. Die Bewegung wird durch den Ort x und die Geschwindigkeit $v = dx/dt$ charakterisiert.

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, v, t) = -\frac{\partial}{\partial x} (v p(x, v, t)) + \frac{\partial}{\partial v} \left[\left(\frac{V'(x)}{m} + \frac{\beta}{m} v \right) p(x, v, t) \right] + \frac{\beta kT}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} p(x, v, t) \quad (2.28)$$

Mit

$$\beta = 1 ; \quad m = 1 ; \quad V(x) = \alpha x^2 ; \quad \frac{kT}{m} = \sigma^2 \quad (2.29)$$

wird die Kramer-Gleichung zu

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, v, t) = -\frac{\partial}{\partial x} (v p(x, v, t)) + \frac{\partial}{\partial v} [(2\alpha x + v) p(x, v, t)] + \sigma^2 \frac{\partial^2}{\partial v^2} p(x, v, t) \quad (2.30)$$

Die stationäre Lösung $p_s(x, v, t)$ für $t \rightarrow \infty$ lautet:

$$p_s(x, v) = C \exp \left\{ -\frac{\alpha x^2}{\sigma^2} - \frac{v^2}{2\sigma^2} \right\} \quad (2.31)$$

C ist ein geeignet zu wählender Normierungsfaktor.

Die Kramer-Gleichung (2.30) wurde nun mit der Monte-Carlo-Methode unter Verwendung der Parameter $\alpha = 1$ und $\sigma^2 = 1.0 \cdot 10^9$ und eines Zeitschritts von $\Delta t = 1.0 \cdot 10^{-2}$ gelöst. Die Simulation wurde für 1000 Zeitschritte durchgeführt, was eine befriedigende Annäherung an den stationären Zustand erbrachte. Die stochastischen Differenzengleichungen in der Simulation lauteten:

$$\Delta x = v \Delta t \quad (2.32)$$

$$\Delta v = -(2\alpha x + v) \Delta t + \sqrt{2\sigma^2} \Delta W \quad (2.33)$$

Die Abbildungen Abb.10 und Abb.11 zeigen die berechneten Verteilungsfunktionen $p_s(x, v = 0)$ und $p_s(x = 0, v)$, die entsprechenden analytischen Lösung gemäß (2.31) und angepaßte Gauß-Kurven. Auch dieses Beispiel bestätigt klar die Brauchbarkeit der Monte-Carlo-Methode zur Lösung von Fokker-Planck-Gleichungen.

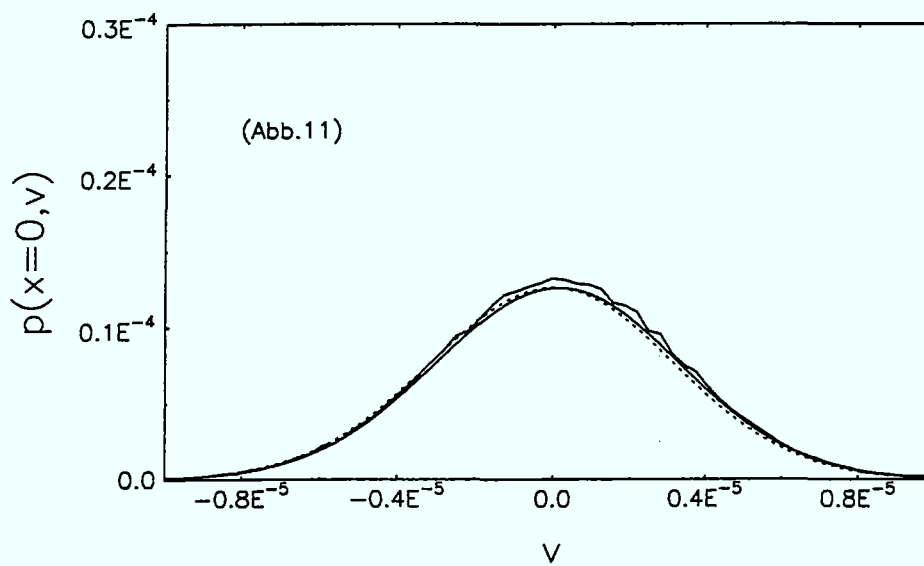
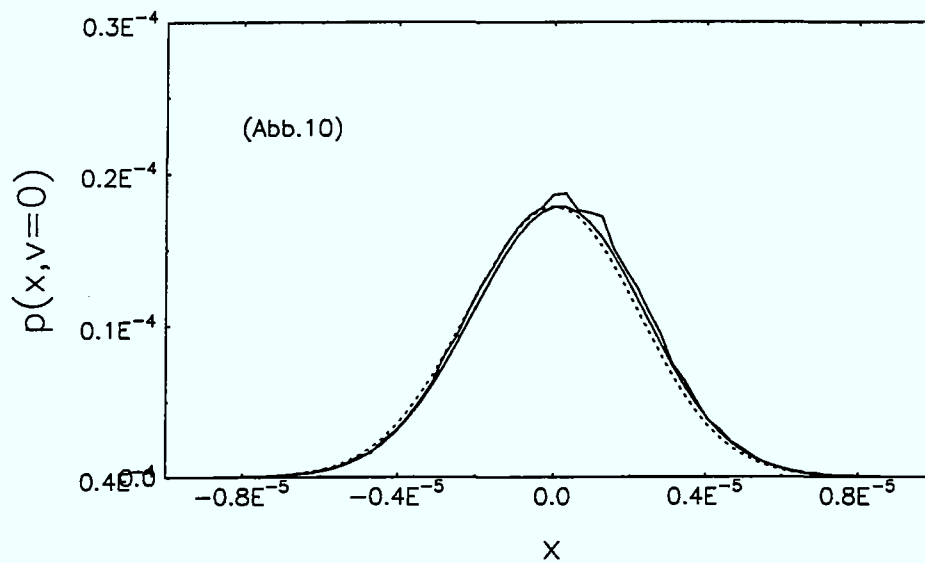


Abbildung 2.4: Resultate aus der Monte-Carlo-Simulation zur Lösung der Kramer-Gleichung (2.30). Die durchgezogenen Linien stellen die berechnete Verteilungsfunktion und die angepaßte Gauß-Funktion dar, die punktierte die analytische Gauß-Funktion.

2.4.3 Beispiel 3: Der Coulomb-Stoßterm

Im letzten Beispiel sollen Spezialfälle der Gleichungen (1.35) und (1.48) gelöst werden. Betrachtet wird der stationäre Zustand von Testteilchen vor einem räumlich homogenen Plasmahintergrund unter alleiniger Berücksichtigung von Coulomb-Stößen. Er ergibt sich als Lösung der Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}, t) = & \left(- \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\frac{w_i}{w} \{ \Delta w_{\parallel} \} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \left[\frac{1}{2} \left(\delta_{ik} - \frac{w_i w_k}{w^2} \right) \{ \Delta w_{\perp}^2 \} + \frac{w_i w_k}{w^2} \{ \Delta w_{\parallel}^2 \} \right] \right) f(\mathbf{v}, t) \end{aligned} \quad (2.34)$$

im Limit $t \rightarrow \infty$ (siehe die Erläuterungen zur Gleichung (1.35)) und wird durch eine Maxwell-Verteilung beschrieben.

$$f_s(\mathbf{v}) = \left(\frac{m}{2\pi T_\beta} \right)^{3/2} \exp \left\{ - \frac{m}{2\pi T_\beta} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_\beta^0)^2 \right\} \quad (2.35)$$

Dabei bezeichnen T_β und $\mathbf{v}_\beta^0$ wieder die Temperatur bzw. die mittlere Geschwindigkeit der Hintergrundteilchen β . Die Angabe der Parameter $\mathbf{v}_\beta^0$, m_β , m_α , Z_β , Z_α , n_β und T_β legt die Koeffizienten der Gleichung (2.34) fest. Die Lösung dieser Gleichung wurde mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode durchgeführt, wozu die folgenden Trajektorien-Gleichungen benutzt wurden:

$$\begin{aligned} \Delta v_i = & \hat{w}_{1i} \{ \Delta w_{\parallel} \} \Delta t + \hat{w}_{1i} \sqrt{\{ \Delta w_{\parallel}^2 \} \Delta t} \gamma_1 \\ & + \hat{w}_{2i} \sqrt{\frac{1}{2} \{ \Delta w_{\perp}^2 \} \Delta t} \gamma_2 + \hat{w}_{3i} \sqrt{\frac{1}{2} \{ \Delta w_{\perp}^2 \} \Delta t} \gamma_3 \end{aligned} \quad (2.36)$$

Hierbei sind γ_1 , γ_2 und γ_3 gaußverteilte Zufallszahlen mit Mittelwert 0 und Varianz 1 und $\hat{w}_{1i}$, $\hat{w}_{2i}$ und $\hat{w}_{3i}$ Komponenten der Einheitsvektoren

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{w}}_1 &= \frac{\mathbf{w}}{w} \\ \hat{\mathbf{w}}_2 &= \frac{1}{\sqrt{1 - (\hat{\mathbf{w}}_1 \mathbf{b})^2}} ((\hat{\mathbf{w}}_1 \mathbf{b}) \hat{\mathbf{w}}_1 - \mathbf{b}) \\ \hat{\mathbf{w}}_3 &= - \frac{1}{\sqrt{1 - (\hat{\mathbf{w}}_1 \mathbf{b})^2}} (\hat{\mathbf{w}}_1 \times \mathbf{b}) \end{aligned} \quad (2.37)$$

wobei

$$\mathbf{w} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_\beta^0 \quad ; \quad \mathbf{b} = \frac{\mathbf{v}_\beta^0}{v_\beta^0} \quad (2.38)$$

ist. Die Abbildungen Abb.12 – Abb.14 zeigen die Resultate aus der Monte-Carlo-Simulation für die Parameter

$$\begin{aligned} m_\alpha &= 12 m_p = 2.007 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \quad (\text{Kohlenstoff}) \\ m_\beta &= 2 m_p = 3.345 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad (\text{Deuterium}) \\ Z_\alpha &= Z_\beta = 1 \\ n_\beta &= 5.0 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3} \\ T_\beta &= 1.602 \cdot 10^{-17} \text{ J} = 100 \text{ eV} \\ \mathbf{v}_\beta^0 &= (9.95 \cdot 10^2, 0.00, -9.95 \cdot 10^3) \text{ ms}^{-1} \\ \Delta t &= 1.0 \cdot 10^{-7} \text{ s} \end{aligned}$$

Berechnet wurden die Verteilungsfunktionen $f(v_x, t)$, $f(v_y, t)$ und $f(v_z, t)$ für $t = 0.05 \text{ s}$, um eine hinreichende Annäherung an die stationäre Verteilung zu gewährleisten. 10000 Simulationsteilchen wurden verwendet, um eine illustrative Darstellung der berechneten Verteilungsfunktionen zu erhalten. In den Abbildungen sind ebenfalls die analytischen Lösungen

$$f_s(v_i) = \left(\frac{m}{2\pi T_\beta} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m}{2\pi T_\beta} (v_i - v_{\beta i}^0)^2 \right\} \quad (2.39)$$

ingezeichnet und zudem noch angepaßte Gauß-Kurven, die über die Momente $\langle v_i \rangle$ und $\langle v_i^2 \rangle$, wie sie sich durch Integration der berechneten Verteilungsfunktionen ergaben, festgelegt wurden. Die Abbildungen lassen eine gute Übereinstimmung, insbesondere der angepaßten Gauß-Kurven, mit dem analytischen Ergebnis (2.39) erkennen.

Dieselbe Situation wird nun noch ein zweites Mal betrachtet, wobei aber der Stoßterm in den driftkinetischen Variablen $v_{\parallel}$ und $v_{\perp}$ ausgedrückt sei

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(v_{\parallel}, v_{\perp}, t) &= \left(- \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\frac{w_i}{w} \{ \Delta w_{\parallel} \} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \left[\frac{1}{2} \left(\delta_{ik} - \frac{w_i w_k}{w^2} \right) \{ \Delta w_{\perp}^2 \} + \frac{w_i w_k}{w^2} \{ \Delta w_{\parallel}^2 \} \right] \right) f(v_{\parallel}, v_{\perp}, t) \end{aligned} \quad (2.40)$$

Wie bereits in den Erläuterungen zur Gleichung (1.48) gesagt, sind die Koordinaten v_1 , v_2 und v_3 als Hilfskoordinaten für ein im Grunde zweidimensionales Problem anzusehen. Dies wird berücksichtigt durch die Wahl

$$\begin{aligned}
w_1 &= v_1 - v_{\beta 1}^0 = v_{\parallel} - v_{\beta}^0 \\
w_2 &= v_2 - v_{\beta 2}^0 = v_{\perp} \\
w_3 &= v_3 - v_{\beta 3}^0 = 0
\end{aligned} \tag{2.41}$$

und die Konstruktionsvorschriften:

$$\begin{aligned}
\Delta v_1 &= \frac{v_{\parallel} - v_{\beta}^0}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \{\Delta w_{\parallel}\} \Delta t + \frac{v_{\parallel} - v_{\beta}^0}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \sqrt{\{\Delta w_{\parallel}^2\} \Delta t} \gamma_1 \\
&\quad - \frac{v_{\perp}}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \sqrt{\frac{1}{2} \{\Delta w_{\perp}^2\} \Delta t} \gamma_2 \\
\Delta v_2 &= \frac{v_{\perp}}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \{\Delta w_{\parallel}\} \Delta t + \frac{v_{\perp}}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \sqrt{\{\Delta w_{\parallel}^2\} \Delta t} \gamma_1 \\
&\quad + \frac{v_{\parallel} - v_{\beta}^0}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \sqrt{\frac{1}{2} \{\Delta w_{\perp}^2\} \Delta t} \gamma_2 \\
\Delta v_3 &= \sqrt{\frac{1}{2} \{\Delta w_{\perp}^2\} \Delta t} \gamma_3
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Wieder sind die Größen γ_1 , γ_2 und γ_3 gaußverteilte Zufallszahlen, die für jeden Zeitschritt gezogen werden. Nach jedem Zeitschritt werden $v_{\parallel}$ und $v_{\perp}$ aktualisiert:

$$\begin{aligned}
v_{\parallel}(t + \Delta t) &= v_{\parallel}(t) + \Delta v_1 \\
v_{\perp}(t + \Delta t) &= \sqrt{(v_{\perp}(t) + \Delta v_2)^2 + (\Delta v_3)^2}
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Die stationäre Lösung von (2.40) lautet

$$f_s(v_{\parallel}, v_{\perp}) = \left(\frac{m}{2\pi T_{\beta}} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m}{2\pi T_{\beta}} (v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{m}{2\pi T_{\beta}} v_{\perp}^2 \right\} \tag{2.44}$$

Die Ergebnisse für die Monte-Carlo-Simulation (verwendet wurden oben angegebene Parameter) sind in den Abbildungen Abb.15 und Abb.16 zu sehen. Auch hier sind wieder die analytische Lösung (2.44) und eine angepaßte Gauß-Kurve zum Vergleich eingezeichnet.

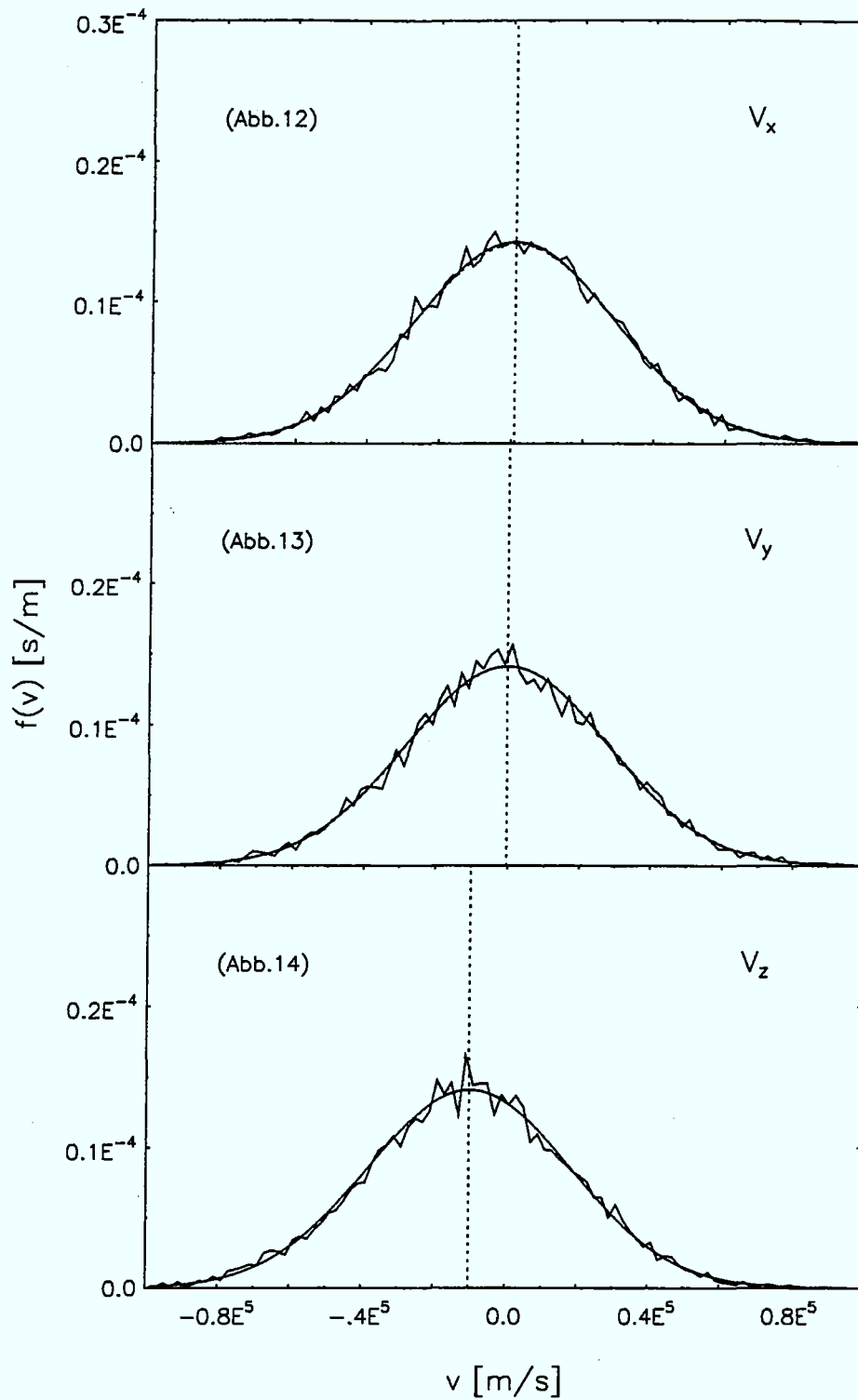


Abbildung 2.5: Resultate aus der Monte-Carlo-Simulation zur Lösung der Gleichung (2.34). Die durchgezogenen Linien stellen die berechnete Verteilungsfunktion und die angepaßte Gauß-Funktion dar, die punktierte die analytische Gauß-Funktion (sie sind in dieser Auflösung nicht mehr unterscheidbar). Die punktierte senkrechte Linie markiert den theoretischen Mittelwert der Funktionen $f_s(v_i)$.

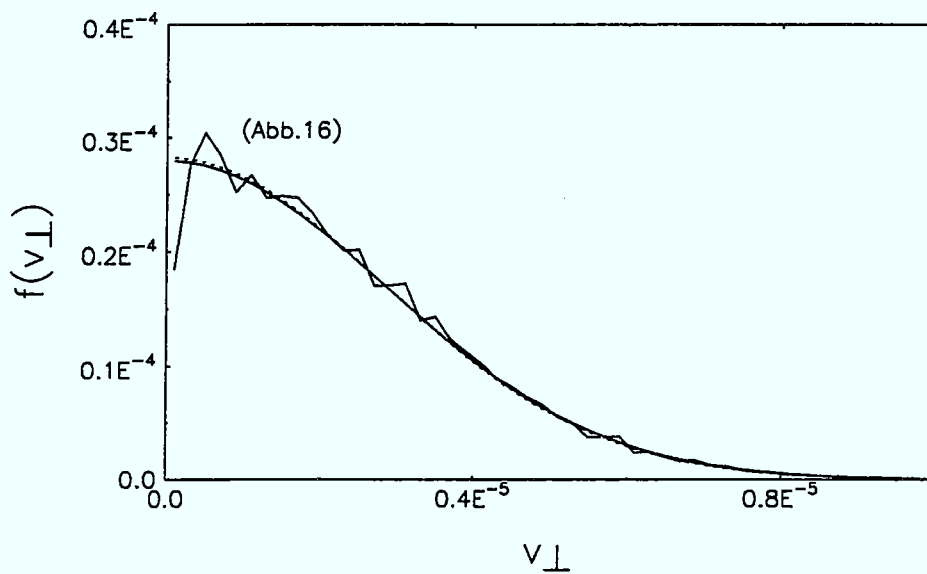
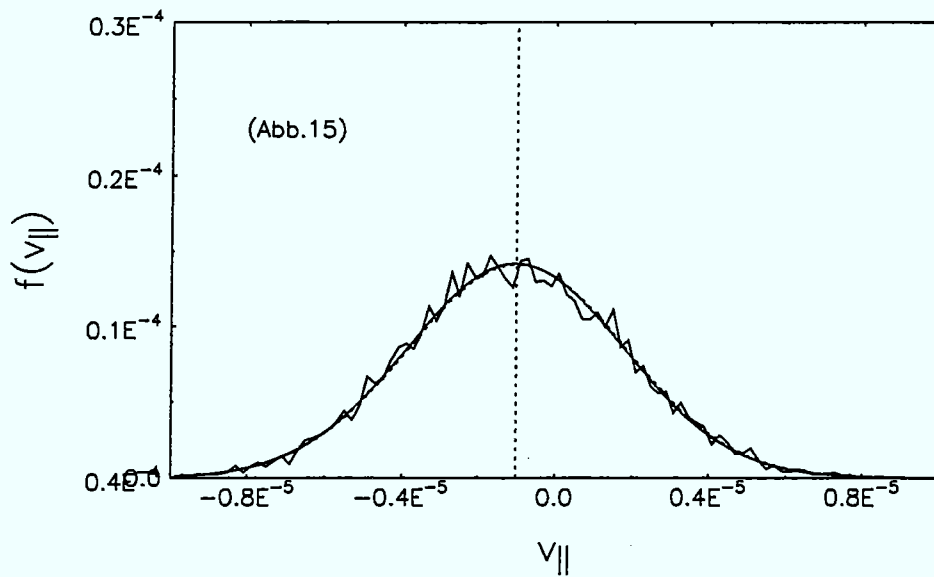


Abbildung 2.6: Resultate aus der Monte-Carlo-Simulation zur Lösung der Gleichung (2.40). Die durchgezogenen Linien stellen die berechnete Verteilungsfunktion und die angepaßte Gauß-Funktion dar, die punktierte die analytische Gauß-Funktion (sie sind in dieser Auflösung nicht mehr unterscheidbar). Die punktierte senkrechte Linie markiert den theoretischen Mittelwert der Funktion $f_s(v_{||})$.

Kapitel 3

Einbeziehung von Teilchenerzeugungs- und Teilchenvernichtungsprozessen in das Modell

3.1 Vorbemerkungen

Ein realistisches Modell zur Untersuchung des Verhaltens von Verunreinigungen in Tokamak-Randschichtplasmen erfordert neben einem Modell für den Transport der Ionen die Berücksichtigung von Teilchenumwandlungsprozessen infolge Ionisation, Rekombination, Umladungsprozessen etc.. Derartige Prozesse können mit Hilfe der in Abschnitt 2.1 erwähnten Master-Gleichung beschrieben werden. In diesem Kapitel soll gezeigt werden, wie das oben skizzierte Transportmodell erweitert und der Monte-Carlo-Algorithmus entsprechend modifiziert werden kann.

3.2 Master-Gleichung und Sprungprozesse

Die Master-Gleichung stellt einen Sonderfall ($A_i = 0$; $B_{ik} = 0$) der Gleichung (2.9) dar:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') = \int \left[W(\mathbf{z} | \mathbf{x}, t) p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t') - W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') \right] d\mathbf{x} \quad (3.1)$$

Die Bedeutung dieser Gleichung und insbesondere der Koeffizienten $W(\mathbf{z} | \mathbf{x}, t)$ wird deutlich, wenn die Gleichung (3.1) in erster Ordnung Δt ($\Delta t = t' - t$) gelöst wird.

Wieder gelte die Anfangsbedingung:

$$p(z, t | \mathbf{y}, t) = \delta(z - \mathbf{y}) \quad (3.2)$$

Es folgt für kleine Δt :

$$p(z, t + \Delta t | \mathbf{y}, t) = \delta(z - \mathbf{y}) \left(1 - \int W(\mathbf{x} | \mathbf{y}, t) \Delta t d\mathbf{x} \right) + W(z | \mathbf{y}, t) \Delta t \quad (3.3)$$

Man sieht, daß die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen nach einer Zeit Δt noch am Ort $\mathbf{y}$ zu finden ist (gegeben durch den Koeffizienten der Delta-Funktion $\delta(z - \mathbf{y})$), einen endlichen Wert besitzt. Der Anteil von Teilchen, die nicht am Ort $\mathbf{y}$ verbleiben, ist durch die Größe $W(z | \mathbf{y}, t)$ gegeben. Für den Erwartungswert $\langle z(t + \Delta t) \rangle$ gilt damit:

$$\begin{aligned} \langle z(t + \Delta t) \rangle &= \int z p(z, t + \Delta t | \mathbf{y}, t) dz \\ &= \int z \delta(z - \mathbf{y}) \left(1 - \int W(\mathbf{x} | \mathbf{y}, t) \Delta t d\mathbf{x} \right) dz + \int z W(z | \mathbf{y}, t) \Delta t dz \\ &= \mathbf{y} + \int (\mathbf{x} - \mathbf{y}) W(\mathbf{x} | \mathbf{y}, t) \Delta t d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Der zeitliche Verlauf der Zufallsvariablen setzt sich somit aus Stücken zeitlicher Konstanz und sprunghaften Änderungen zusammen. Die Gleichung (3.4) zeigt, daß $W(\mathbf{x} | \mathbf{y}, t)$ als Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für die Änderung $\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x}$ angesehen werden kann.

Obige Gleichungen gelten für den Fall einer kontinuierlichen Zufallsvariablen. Für diskrete Zufallsvariablen gilt die Master-Gleichung in der Form¹:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{n}, t | \mathbf{n}', t') = \sum_{\mathbf{m}} \left[W(\mathbf{n} | \mathbf{m}, t) P(\mathbf{m}, t | \mathbf{n}', t') - W(\mathbf{m} | \mathbf{n}, t) P(\mathbf{n}, t | \mathbf{n}', t') \right] \quad (3.5)$$

¹Die Benennung durch große Buchstaben P in den nächsten beiden Gleichungen soll verdeutlichen, daß bei diskreten Variablen die Wahrscheinlichkeitsdichte p durch die Wahrscheinlichkeit P ersetzt werden muß. Erwartungswerte sind jeweils auf folgende Weise definiert:

$$\begin{aligned} \langle R \rangle &= \int R(\omega) p(\omega) d\omega \\ \langle R \rangle &= \sum_{\omega} R(\omega) P(\omega) \end{aligned}$$

Die approximative Lösung für kleine Δt lautet:

$$P(\mathbf{n}, t + \Delta t | \mathbf{n}', t) = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \left(1 - \sum_m W(\mathbf{m} | \mathbf{n}', t) \Delta t \right) + W(\mathbf{n} | \mathbf{n}', t) \Delta t \quad . \quad (3.6)$$

Die Konstruktion der Pfade einer Zufallsvariablen $\mathbf{X}(t)$ gemäß der Master-Gleichung (3.5) findet, wie im Monte-Carlo-Algorithmus für die Diffusionsprozesse, für diskrete Zeitschritte Δt statt. Das Verfahren soll hier nur für diskrete Zufallsvariablen erläutert werden.

Es sei $\mathbf{m}$ der Wert von $\mathbf{X}(t)$ zum Zeitpunkt t . Mit Hilfe einer in $[0, 1]$ gleichverteilten Zufallszahl η_1 wird entschieden, ob der Wert von $\mathbf{X}(t)$ nach der Zeit Δt geändert wird:

$$\begin{aligned} \eta_1 &\leq 1 - \sum_m W(\mathbf{n} | \mathbf{m}, t) \Delta t & : & \text{Keine Änderung von } \mathbf{X} \\ \eta_1 &> 1 - \sum_m W(\mathbf{n} | \mathbf{m}, t) \Delta t & : & \text{Änderung von } \mathbf{X} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Wird hierbei für eine Änderung von $\mathbf{X}(t)$ entschieden, so wird eine zweite in $[0, 1]$ gleichverteilte Zufallszahl η_2 herangezogen, um zu entscheiden, welchen Wert $\mathbf{X}(t)$ nach der Zeit Δt annimmt. Dazu wird eine kumulative Übergangswahrscheinlichkeit C_i wie folgt definiert: Die möglichen Werte von $\mathbf{X}(t + \Delta t)$, die ungleich $\mathbf{m}$ sind, seien mit einem Index i durchnummeriert und mit $\mathbf{n}_i$ bezeichnet. Dann ist:

$$C_i = \frac{\sum_{k=1}^i W(\mathbf{n}_k | \mathbf{m}, t) \Delta t}{\sum_k W(\mathbf{n}_k | \mathbf{m}, t) \Delta t} \quad i = 1, 2, \dots \quad (3.8)$$

Die Summe im Nenner geht über alle möglichen Indizes $k = 1, 2, \dots$. Der Wert von C_0 ist gleich 0. Die Entscheidung im Falle $\eta_1 > 1 - \sum_m W(\mathbf{n} | \mathbf{m}, t) \Delta t$ wird dann gemäß der Vorschrift:

$$C_{i-1} < \eta_2 \leq C_i \quad \rightarrow \quad \mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{n}_i \quad (3.9)$$

getroffen.

3.3 Verknüpfung der Diffusions- und Sprungprozesse des physikalischen Modells für die Verunreinigungen

Die Ausführungen des letzten Abschnitts sollen nun auf die Ionisations- und Rekombinationsprozesse (und ähnlich geartete Prozesse) übertragen und in das in Kapitel 1 beschriebene Transportmodell eingebettet werden, d. h. das Modell soll auf verschiedene Ionisationsstufen der Teilchen und die Möglichkeit von Ladungsänderungen erweitert werden. Die Sprungprozesse, die Übergänge zwischen den Ionisationsstufen verursachen, bestimmen die Gesamtzahl $\hat{N}_Z(t)$ der vorhandenen Teilchen einer Spezies Z ($Z \equiv$ Ionisationsstufe) und damit die räumliche Dichte $n_Z(\mathbf{x}, t)$, die durch

$$n_Z(\mathbf{x}, t) = \int \hat{N}_Z(t) f_Z(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \quad (3.10)$$

gegeben ist. Die Verknüpfung der Sprungprozesse und der Transportprozesse wird einfach dadurch erreicht, daß nicht mehr nur die auf 1 normierte Verteilungsfunktion $f_Z(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ betrachtet wird, sondern auch die Gesamtzahl $\hat{N}_Z(t)$. $\hat{N}_Z(t)$ soll dabei als Komponente des Erwartungswertes $\langle N(t) \rangle$ des Anzahlvektors $N(t)$ definiert sein, wobei die Komponenten $N_0(t)$, $N_1(t)$, $N_2(t)$, ... für die Anzahl von Teilchen im Ladungszustand $Z = 0, 1, 2, \dots$ stehen. Es soll eine Wahrscheinlichkeitsfunktion $P(N, t)$ existieren, so daß

$$\langle N(t) \rangle = \sum_N N P(N, t) \quad (3.11)$$

gilt, und diese Funktion $P(N, t)$ soll einer Master-Gleichung gehorchen, die die Ionisation, Rekombination etc. beschreibt.

$$\frac{\partial}{\partial t} P(N, t) = \sum_M [W(N|M, t) P(M, t) - W(M|N, t) P(N, t)] \quad (3.12)$$

Die Summationen in den Gleichungen (3.11) und (3.12) erstrecken sich über alle möglichen Realisierungen der Vektoren N bzw. M , wobei unter Umständen noch Nebenbedingungen zu berücksichtigen sind (wie z. B. $\sum_Z N_Z = \text{const.}$). Die Simulation der Trajektorien für den Transport muß also durch eine Simulation der Pfade für die Sprungprozesse ergänzt werden, wozu der im letzten Abschnitt beschriebene Algorithmus dient. Er findet Anwendung, indem eine große Zahl von Simulationsteilchen über viele Zeitschritte Δt hinweg verfolgt wird und für jedes Teilchen bei jedem Zeitschritt entschieden wird, ob eine Ionisation oder Rekombination (oder ähnliches) stattfindet.

Kapitel 4

Ein Monte-Carlo-Code für numerische Anwendungen bei TEXTOR-Plasmen

4.1 Vorbemerkungen

In diesem Kapitel sollen numerische Anwendungen vorgestellt werden, die auf den in den vorangehenden Kapiteln erläuterten Konzepten fußen. Die praktischen Rechnungen wurden mit Hilfe eines FORTRAN-Codes durchgeführt, bei dessen Entwicklung man sich am DIVIMP-Code von P. C. Stangeby [9] orientierte. Details zum momentanen Status des Monte-Carlo-Codes und erste Resultate für TEXTOR-Randschicht-Plasmen bilden den Inhalt der nächsten Abschnitte.

4.2 Die Grundgleichungen für die Simulation

Der Monte-Carlo-Code, der in dieser Arbeit genutzt wurde, beinhaltet das Transportmodell für die Verunreinigungen, das durch Gleichung (1.48) definiert ist. Die Ionen werden durch eine große Zahl von Simulationsteilchen repräsentiert, für die eine Startverteilung im Phasenraum als Input vorgegeben, oder vom Code – durch Ausstreuen von Neutralteilchen und anschließender Verfolgung derselben bis zur Ionisation – erzeugt wird.

Die Bewegung der Ionen im Phasenraum wird durch Konstruktion der Trajektorien gemäß folgender Vorschrift (siehe Abschnitte 1.4 und 2.4.3) simuliert¹:

$$\Delta \mathbf{R} = \left(v_{\parallel} \mathbf{b} + \frac{1}{B^2} \mathbf{E} \times \mathbf{B} \right) \Delta t + \sqrt{D_{\perp} \Delta t} \hat{\mathbf{r}} \gamma_0 \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \Delta v_1 &= \frac{v_{\parallel} - v_{\beta}^0}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \{ \Delta w_{\parallel} \}_Z \Delta t + \frac{v_{\parallel} - v_{\beta}^0}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \sqrt{\{ \Delta w_{\parallel}^2 \}_Z \Delta t} \gamma_1 \\ &\quad - \frac{v_{\perp}}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \sqrt{\frac{1}{2} \{ \Delta w_{\perp}^2 \}_Z \Delta t} \gamma_2 + \frac{Ze}{m} \mathbf{E} \mathbf{b} \Delta t \\ \Delta v_2 &= \frac{v_{\perp}}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \{ \Delta w_{\parallel} \}_Z \Delta t + \frac{v_{\perp}}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \sqrt{\{ \Delta w_{\parallel}^2 \}_Z \Delta t} \gamma_1 \\ &\quad + \frac{v_{\parallel} - v_{\beta}^0}{\sqrt{(v_{\parallel} - v_{\beta}^0)^2 + v_{\perp}^2}} \sqrt{\frac{1}{2} \{ \Delta w_{\perp}^2 \}_Z \Delta t} \gamma_2 \\ \Delta v_3 &= \sqrt{\frac{1}{2} \{ \Delta w_{\perp}^2 \}_Z \Delta t} \gamma_3 \end{aligned} \quad (4.2)$$

Die Zahlen $\gamma_0, \dots, \gamma_3$ sind gaußverteilte Zufallszahlen mit Mittelwert 0 und Varianz 1, die für jeden Zeitschritt gezogen werden. Der Index Z bezeichnet die Ionisationsstufe der Verunreinigung.

Die Werte von $v_{\parallel}$ und $v_{\perp}$ werden nach jedem Zeitschritt aktualisiert,

¹An dieser Stelle sei auf den wesentlichen Unterschied zwischen dem hier verwendeten Algorithmus und der im DIVIMP-Code benutzten Simulationemethode hingewiesen. Im DIVIMP-Code wird nur die Parallelkomponente der Geschwindigkeit berücksichtigt und die Konstruktionsvorschriften für die Trajektorien lauten :

$$\Delta \mathbf{R} = v_{\parallel} \mathbf{b} \Delta t + \sqrt{D_{\perp} \Delta t} \hat{\mathbf{r}} \gamma_0$$

$$\Delta v_{\parallel} = \{ \Delta w_{\parallel} \}_Z \Delta t + \sqrt{\{ \Delta w_{\parallel}^2 \}_Z \Delta t} \gamma_1 + \frac{Ze}{m} \mathbf{E} \mathbf{b} \Delta t + F_{\parallel} \Delta t$$

Es wird also die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift vernachlässigt und der Coulomb-Stoßterm nur in Teilen berücksichtigt. Zweiteres hat einen systematischen Fehler – insbesondere bei der Berechnung von Temperaturen – zur Folge. (Die Kraft $F_{\parallel}$ bezeichnet Temperaturgradientenkräfte, die im DIVIMP-Code berücksichtigt werden; auf sie soll nicht weiter eingegangen werden. Der hier verwendete Algorithmus kann ebenfalls problemlos um solche geschwindigkeitsunabhängigen Kräfte erweitert werden.)

$$\begin{aligned}
v_{||}(t + \Delta t) &= v_{||}(t) + \Delta v_1 \\
v_{\perp}(t + \Delta t) &= \sqrt{(v_{\perp}(t) + \Delta v_2)^2 + (\Delta v_3)^2}
\end{aligned} \tag{4.3}$$

Desweiteren wird bei jedem Zeitschritt mit Hilfe der in Abschnitt 3.2 erläuterten Methode (siehe (3.7) und (3.8)) die Möglichkeit der Ionisation oder Rekombination berücksichtigt, indem eine auf $[0, 1]$ gleichverteilte Zufallszahl η_1 gezogen wird und nach der Vorschrift

$$\begin{aligned}
\eta_1 \leq n_e [\langle \sigma v \rangle_I^Z + \langle \sigma v \rangle_R^Z] \Delta t & : \quad \text{Ionisation oder Rekombination} \\
\eta_1 > n_e [\langle \sigma v \rangle_I^Z + \langle \sigma v \rangle_R^Z] \Delta t & : \quad \text{Weder Ionisation} \\
& \quad \text{noch Rekombination}
\end{aligned} \tag{4.4}$$

entschieden wird, ob sich der Ladungszustand ändert, oder nicht (das Zeitintervall Δt ist dabei so zu wählen, daß die rechte Seite kleiner oder gleich 1 ist). n_e ist die Elektronendichte des Hintergrundplasmas und $\langle \sigma v \rangle_I^Z$ und $\langle \sigma v \rangle_R^Z$ die Ionisations- bzw. Rekombinationsrate der Verunreinigung mit Ladung Z . Die Größen $\langle \sigma v \rangle_I^Z$ und $\langle \sigma v \rangle_R^Z$ können aus empirischen Daten gewonnen oder mit Hilfe von Näherungsformeln berechnet werden. In dieser Arbeit wurden die folgenden Formeln [10] benutzt:

$$\langle \sigma v \rangle_I^Z = \frac{a_i \sqrt{T_e} \exp \{-b_i/T_e\}}{1 + c_i T_e} \tag{4.5}$$

$$\langle \sigma v \rangle_R^Z = d_i T_e^{-e_i} + f_i T_e^{-3/2} \exp \{-g_i/T\} (1 + h_i \exp \{-j_i/T\}) \tag{4.6}$$

Die Koeffizienten $a_i, b_i, \dots, j_i$ sind Fit-Parameter für die jeweilige Teilchenspezies.

Führt obige Zufallsentscheidung zu einer Ladungsänderung, so wird mit Hilfe einer zweiten Zufallszahl η_2 entschieden, ob eine Ionisation oder eine Rekombination stattfindet.

$$\begin{aligned}
\eta_2 \leq \frac{\langle \sigma v \rangle_I^Z}{\langle \sigma v \rangle_I^Z + \langle \sigma v \rangle_R^Z} & : \quad \text{Ionisation} \\
\eta_2 > \frac{\langle \sigma v \rangle_I^Z}{\langle \sigma v \rangle_I^Z + \langle \sigma v \rangle_R^Z} & : \quad \text{Rekombination}
\end{aligned} \tag{4.7}$$

4.3 Weitere Details zu den praktischen Rechnungen

Der beschriebene Simulations-Algorithmus zur Verfolgung der Teilchenbahnen soll nun genutzt werden, um für konkrete Szenarien in TEXTOR-Randschichtplasmen Aufschluß zu geben über die Verteilung der Verunreinigungen. Betrachtet wird hierzu der Poloidalschnitt durch das TEXTOR-Plasma. Das Rechengebiet umfaßt den Außenbereich des Querschnitts ($30 \text{ cm} \leq r \leq 50 \text{ cm}$) und ist in 1084 Zellen aufgeteilt (siehe Abbildungen Abb.17 und Abb.18). Für jede Zelle werden konstante Werte für die Parameter des Hintergrundplasmas (Temperatur, Dichte etc.) und für das Magnetfeld angesetzt. Die Daten für das Hintergrundplasma entstammen Rechnungen mit dem EB2-EIRENE-Code [12] , der ein Fluid-Modell für die Hintergrundionen und die Elektronen [13] mit einem kinetischen Neutralgas-Modell für die Neutralteilchen [14] kombiniert. Der äußere Rand des Rechengebiets wird als Reaktorwand betrachtet. Einzelne ausgesparte Zellen (siehe Abbildung Abb.18) nähern den ALT-Limiter im TEXTOR-Reaktor an. Treffen die Ionen während der Simulation auf eine solche Begrenzung, so wird ein Sputtering simuliert, indem eine Zerstäubungsrate Y mit Hilfe der Bohdansky-Formel [15] ermittelt und das Teilchen mit einem Gewicht von Y wieder in das Plasma eingebracht wird.

$$Y(E_0, \alpha = 0) = Q s_n^{KrC}(\varepsilon) \left(1 - \left(\frac{E_{th}}{E_0}\right)^{2/3}\right) \left(1 - \frac{E_{th}}{E_0}\right)^2 \quad (4.8)$$

Hierin ist E_0 die Energie der auftreffenden Ionen und α der Auftreffwinkel (eine Variation der Sputterrate Y mit dem Winkel α wird vorläufig nicht betrachtet). Desweiteren sind ε die reduzierte Energie und s_n^{KrC} der nukleare Bremsquerschnitt.

$$\varepsilon = E_0 \frac{m_t}{m + m_t} \frac{a_L}{Z Z_t e^2} = \frac{E_0}{E_{TF}} \quad (4.9)$$

Mit der Masse m_t und der Ladung Z_t des Targetatoms.

$$s_n^{KrC}(\varepsilon) = \frac{0.5 \ln(1 + 1.2288 \varepsilon)}{\varepsilon + 0.1728 \sqrt{\varepsilon} + 0.008 \varepsilon^{0.1504}} \quad (4.10)$$

Schließlich ist a_L die Lindhard-Abschirmlänge

$$a_L = 0.4685 (Z^{2/3} + Z_t^{2/3})^{-1/2} \text{ \AA} \quad (4.11)$$

und Q und E_{th} sind Fit-Parameter zur Anpassung an experimentelle Daten. Der innere Rand des Rechengebiets grenzt an das Kernplasma, das aus Gründen der Reduzierung des Rechenaufwands ausgespart wurde. Trifft ein Simulationsteilchen auf diese Begrenzung, so wird es reflektiert. Dieses Vorgehen soll berücksichtigen, daß fortwährend Teilchen aus dem Kernplasma heraustreten und be-

deutet, daß die radialen Flüße von Verunreinigungsteilchen am inneren Rand des Rechengebiets nach innen und nach außen gleich groß sind.

Die Auswertung der Simulation erfolgt über das Auszählen der Teilchen der verschiedenen Ionisationsstufen in den Zellen des Rechengitters. Nach Division durch die Zellenvolumina² liefert dies sofort die (relative) räumliche Dichteverteilung der Teilchen. Diese kann auf absolute Werte umgerechnet werden, indem mit einem Skalierungsfaktor multipliziert wird, der angibt, wieviele reale Teilchen von einem Simulationsteilchen repräsentiert werden (Dieser Skalierungsfaktor ist dem Mechanismus, mit dem die Verunreinigungen ins Plasma gelangen, entsprechend zu wählen). Außerdem können durch gewichtete Zählungen der Teilchen integrale Größen wie mittlere Geschwindigkeit, Temperatur etc. ermittelt werden, ohne zunächst die Verteilungsfunktionen zu berechnen.

Die Auswertung der Teilchenverteilung kann zum einen nur für eine bestimmte Zeit t erfolgen, was der Berechnung der Funktionen $\hat{N}_Z(t)f_Z(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ gleichkommt, oder für jeden Zeitschritt Δt (die Summation der Einzelresultate liefert dann eine kumulative (zeitintegrierte) Verteilungsfunktion). Die zweite Auswertungsmethode ergibt (nach geeigneter Normierung) eine Verteilungsfunktion, die, statt einmalig ausgestreuter Teilchen, fortwährend injizierende Quellen beschreibt. Diese Auswertungsart wurde meistens verwendet, da dies der physikalischen Realität näherkommt. Hierbei ist es jedoch erforderlich, die Simulationsteilchen bis zu ihrem Verschwinden zu verfolgen, da ansonsten die physikalische Bedeutung der kumulativen Verteilungsfunktion nicht sinnvoll definiert ist.

²Hierbei ist zu bemerken, daß die momentane Struktur des Monte-Carlo-Codes und auch des oben beschriebenen Simulationsalgorithmus in keiner Weise die Besonderheiten einer Torus-Geometrie berücksichtigt. Infolgedessen beziehen sich die Ergebnisse auf einen Zylinder, womit z. B. die sogenannten neoklassischen Effekte aus dem Modell herausfallen.

(Abb.17)

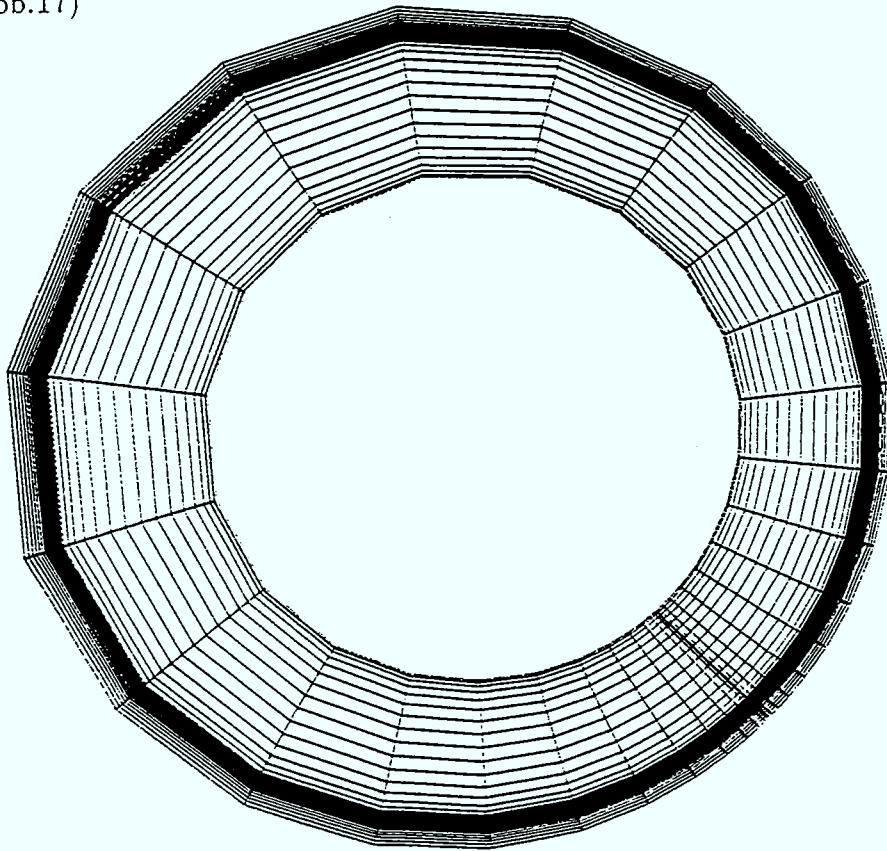


Abbildung 4.1: TEXTOR-Rechengeometrie für die Monte-Carlo-Simulationen (Poloidalschnitt durch den Torus).

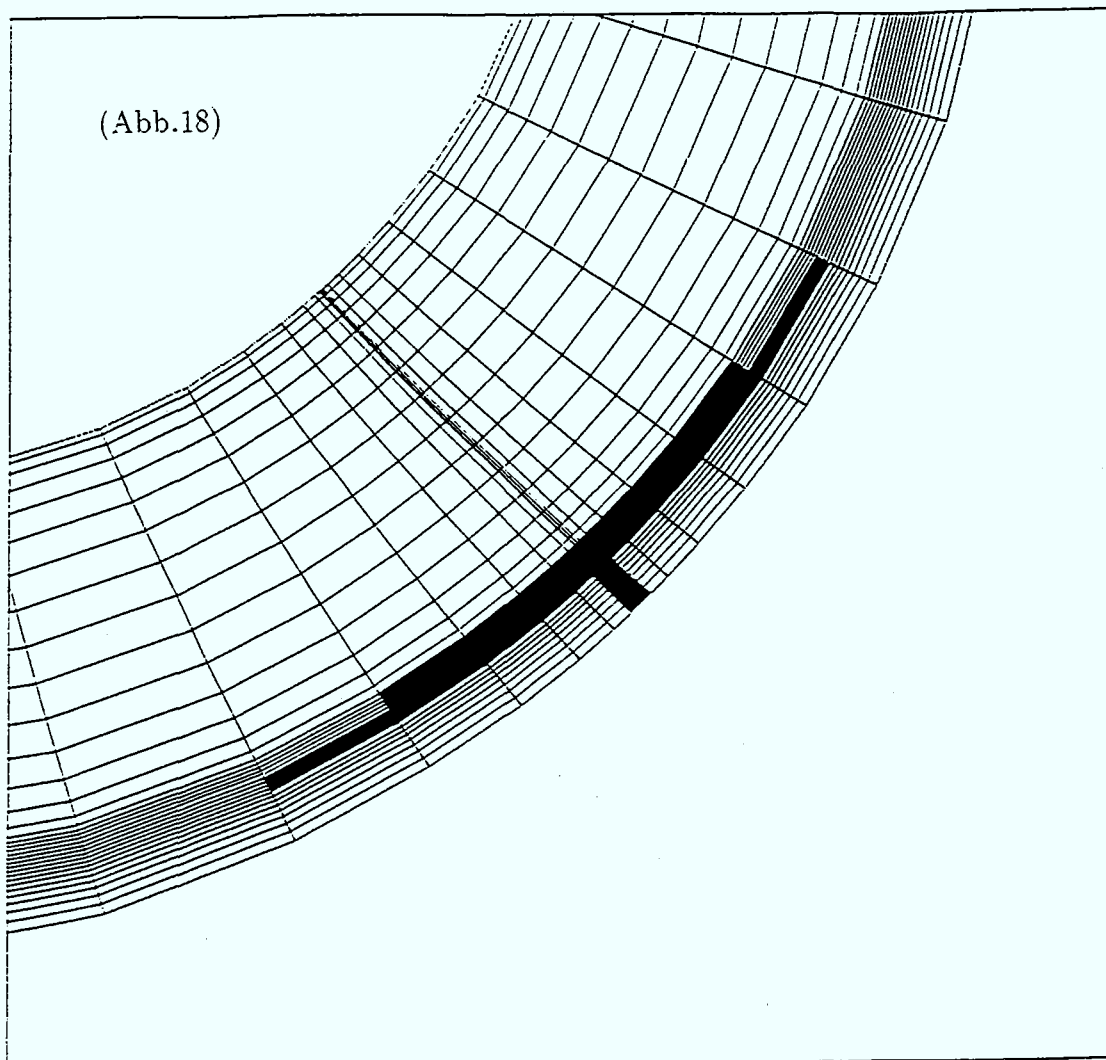


Abbildung 4.2: Ausschnitt aus der TEXTOR-Rechengeometrie für die Monte-Carlo-Simulationen. Die schwarz eingefärbten Zellen nähern den ALT-Limiter an.

4.4 Erste Resultate für Kohlenstoff-Verunreinigungen

Die Abbildungen Abb.20 – Abb.23 zeigen die Dichte, Elektronentemperatur, Deuteriumionentemperatur und die Strömungsgeschwindigkeiten aus einer B2-EIRENE-Rechnung für ein ohmsch geheiztes Plasma im TEXTOR-Reaktor. Diese Daten definierten den Plasma-Hintergrund für Monte-Carlo-Rechnungen zur Bestimmung der Dichte- und Temperaturverteilung von Kohlenstoffionen, die aufgrund der physikalischen Zerstäubung des ALT-Limiters im Plasma vorhanden sind (Deuteriumionen schlagen Kohlenstoffatome aus dem ALT-Limiter, welche anschließend ionisiert werden). In diesen ersten Modell-Rechnungen wurde das elektrische Feld E zunächst vernachlässigt ($E = 0$), um die Diskussion übersichtlich zu halten. Damit wird also (siehe die Gleichungen (4.1) und (4.2)) eine Situation betrachtet, in der die Kohlenstoffionen sich unter der Wirkung der Coulomb-Stöße mit den Deuteriumionen und einer anomalen Diffusion in radialer Richtung bewegen. Der Diffusionskoeffizient für den anomalen Transport wurde zu $D_{\perp} = 0.5 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ gewählt. Ein Selfsputtering wurde vorläufig ausgespart. Die Quellverteilung der Kohlenstoffatome wurde durch ein Ausstreuen von Neutralteilchen aus den Seitenflächen des ALT-Limiters erzeugt (Thompson-Verteilung bzgl. Energie und Kosinus-Verteilung bzgl. Ausstreuungswinkel).

Die Dichten der einzelnen Kohlenstoffionenspezies sind in den Abbildungen Abb.24 – Abb.29 dargestellt. Sie zeigen die experimentell bestätigte Lokalisierung der niedrigen Ladungsstufen C^{1+} , C^{2+} und C^{3+} in der Nähe des ALT-Limiters und die räumlich ausgedehnte Verteilung der Spezies C^{4+} , C^{5+} und C^{6+} . Dieses Ergebnis spiegelt die hohe Ionisationswahrscheinlichkeit wider, die von den hohen Elektronentemperaturen im Plasma herrührt und dazu führt, daß die Kohlenstoffionen niedriger Ladungsstufe sehr kurzlebig sind. Diese Kurzlebigkeit schlägt sich auch in den Resultaten für die Temperaturen der einzelnen Ionenspezies nieder, die in den Abbildungen Abb.30 – Abb.35 zu sehen sind. Die C^{1+} -, C^{2+} - und C^{3+} -Ionen besitzen eine Temperatur weit unter der der Hintergrundionen, von denen sie über Coulomb-Stöße Energie aufnehmen. Erst ab der Ladungsstufe C^{4+} ist eine Thermalisierung eingetreten, da die hohen Ladungsstufen über ausreichende Zeit hinweg Energie aufnehmen können. Die Temperaturprofile der Spezies C^{4+} , C^{5+} und C^{6+} lassen infolgedessen das Profil der D^+ -Temperatur erkennen (daß die D^+ -Temperatur in einzelnen Zellen des Simulationsgebiets überschritten wird, hat seine Ursache in statistischen Ungenauigkeiten in den Bereichen niedriger Dichte, die einer verfeinerten numerischen Handhabung bedürften, da sich hierhin auch nur eine statistisch nicht mehr repräsentative Zahl von Simulationsteilchen „verirrt“).

Abschließend sollen die Resultate der Monte-Carlo-Rechnung mit einem experimentellen Ergebnis aus CX-Spektroskopie-Messungen mit Li^0 -Strahlen verglichen werden, die es ermöglichen, absolute Dichten der Spezies C^{4+} , C^{5+} und C^{6+}

zu bestimmen. Die Abbildung Abb.36 zeigt die Meßergebnisse für die äußere Mittelebene des TEXTOR-Torus und Abb.37 die für diesen Bereich berechneten Dichten. Man erkennt eine grobe Übereinstimmung zwischen den berechneten und den gemessenen Dichten in ihrem qualitativen Verlauf. Die berechneten Dichten weisen eine im Verhältnis höhere Dichte der Dichte der C^{6+} -Ionen auf und die Maxima der C^{4+} - und C^{5+} -Profile liegen um ca. 3-4 cm weiter außen als die Maxima der experimentellen Kurven. Eventuell wurden in der Simulation zu hohe Ionisationswahrscheinlichkeiten angesetzt, die dazu führten, daß sich die niedrigen Ladungsstufen nicht allzu weit in das Plasmazentrum hinein bewegen konnten. Möglicherweise entsprach auch der Plasmahintergrund nicht dem betreffenden Experiment oder es mangelt dem theoretischen Modell an einem gewissen Transportmechanismus, der eine Bewegung der Ionen ins Zentrum verursacht. Die augenfälligste Diskrepanz zwischen der Theorie und dem Experiment ist aber in der unterschiedlichen Größenordnung der Dichten zu sehen, die bis zu einem Faktor 10 voneinander abweichen. Diese Diskrepanz ist in erster Linie mit der Unsicherheit des Skalierungsfaktors für die berechneten Dichten zu erklären. Er leitet sich ab aus der Annahme, daß das Sputtern am ALT-Limiter durch Deuteriumionen die einzige Quelle für Kohlenstoffverunreinigungen darstellt. Andere mögliche Quellen wären das Selfsputtering oder die Reaktorwände. Inwieweit tieferliegende Mängel des Modells für die Unterschiede zwischen theoretischen und experimentellen Resultaten verantwortlich sind, soll anhand weiterer Modellrechnungen unter Einbeziehung der elektrischen Felder und Vergleich mit umfassenderen experimentellen Ergebnissen aus bolometrischen Messungen an TEXTOR untersucht werden.

Abb.19

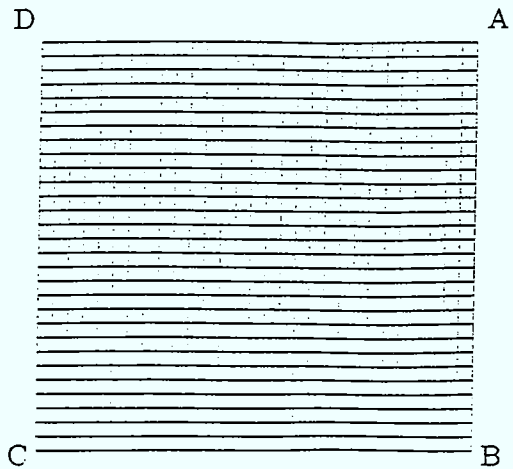
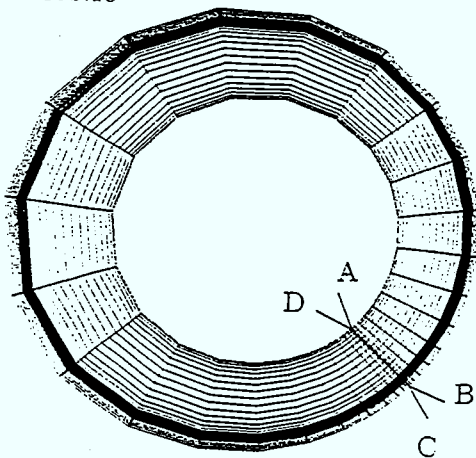


Abbildung 4.3: Zusammenhang zwischen dem TEXTOR-Rechengitter und dem äquidistanten X-Y-Gitter der dreidimensionalen Darstellungen.

Abb.20
 T_i/eV

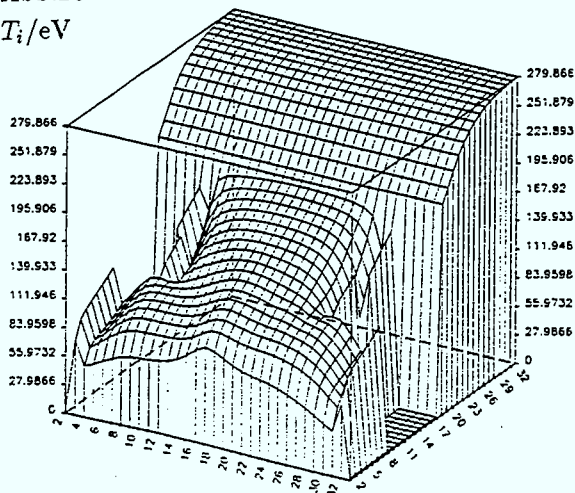


Abb.21
 T_e/eV

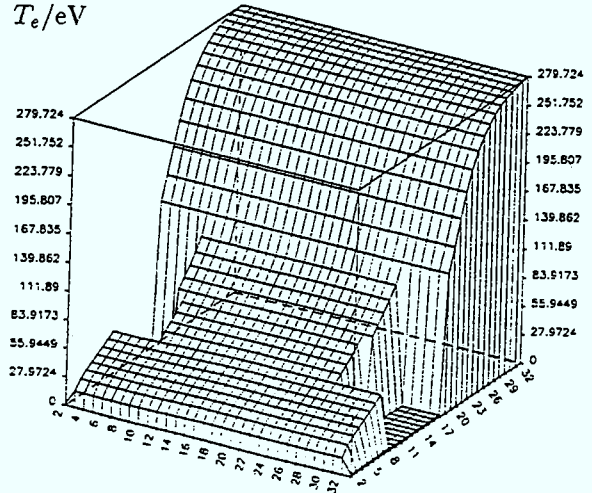


Abbildung 4.4: Elektronen- und Ionentemperatur des Hintergrundplasmas aus B2-EIRENE-Rechnung.

Abb.22

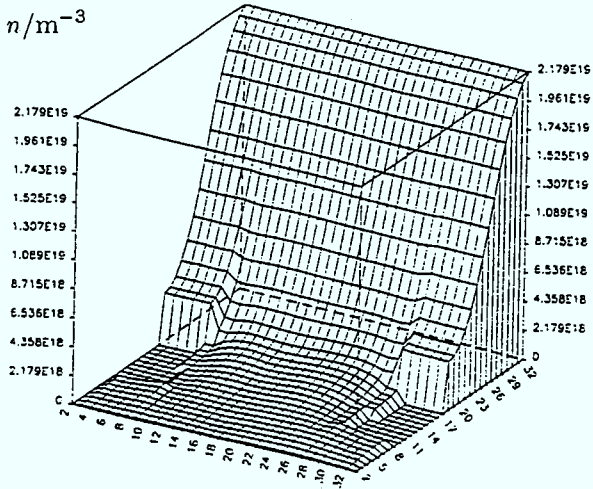
 n/m^{-3} 

Abb.23

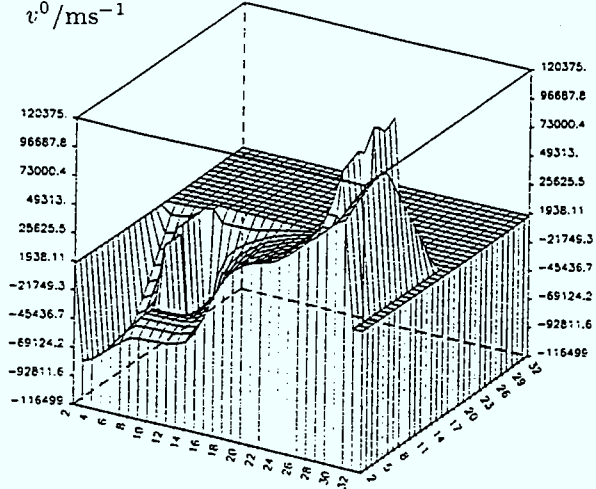
 v^0/ms^{-1} 

Abbildung 4.5: Dichte- und Geschwindigkeitsprofil des Hintergrundplasmas aus B2-EIRENE-Rechnung.

Abb.24

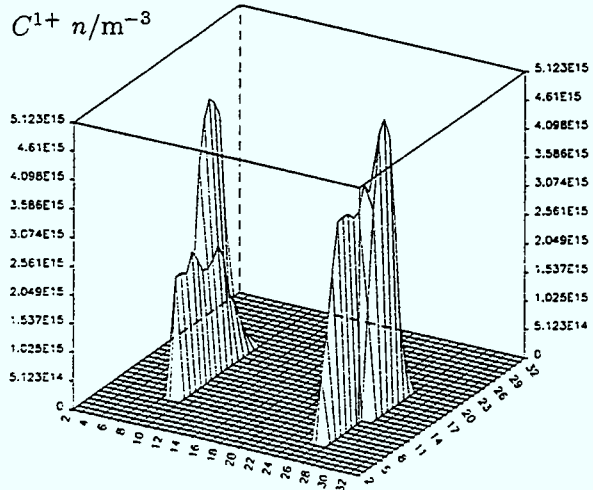
 $C^{1+} n/m^{-3}$ 

Abb.25

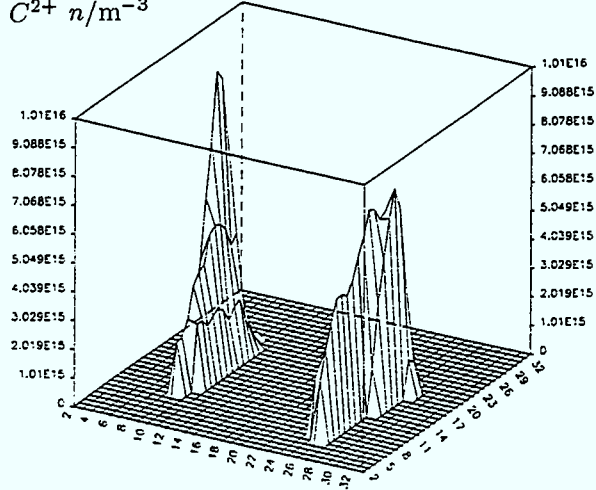
 $C^{2+} n/m^{-3}$ 

Abbildung 4.6: Dichteprofile der Kohlenstoffionen aus der Monte-Carlo-Rechnung.

Abb.26

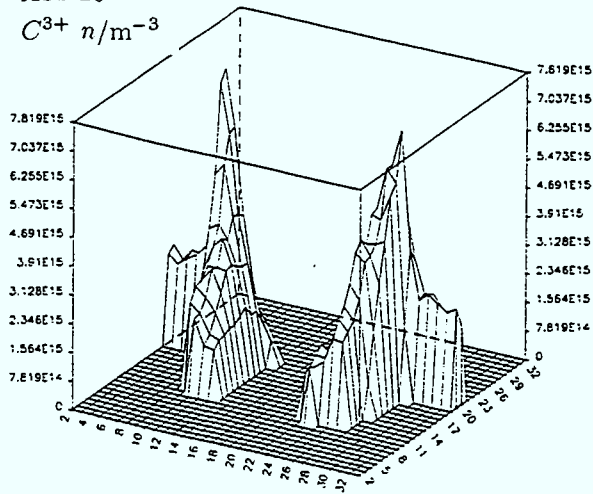
 $C^{3+} \text{ n/m}^{-3}$ 

Abb.27

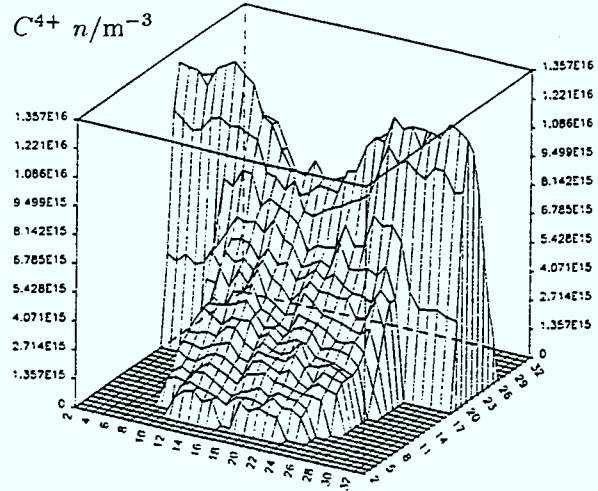
 $C^{4+} \text{ n/m}^{-3}$ 

Abbildung 4.7: Dichteprofile der Kohlenstoffionen aus der Monte-Carlo-Rechnung.

Abb.28

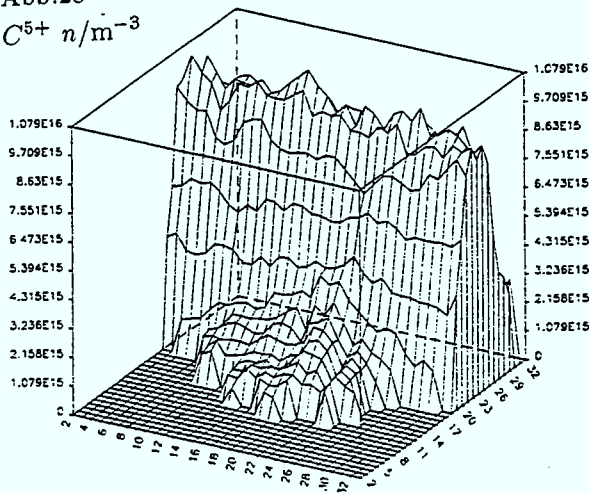
 $C^{5+} \text{ n/m}^{-3}$ 

Abb.29

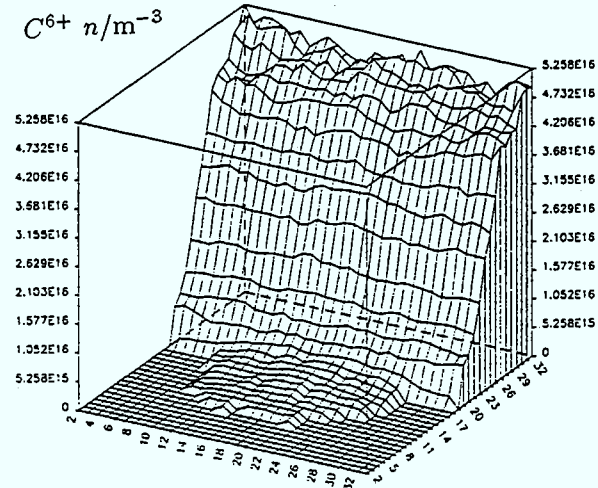
 $C^{6+} \text{ n/m}^{-3}$ 

Abbildung 4.8: Dichteprofile der Kohlenstoffionen aus der Monte-Carlo-Rechnung.

Abb.30
 $C^{1+} T/eV$

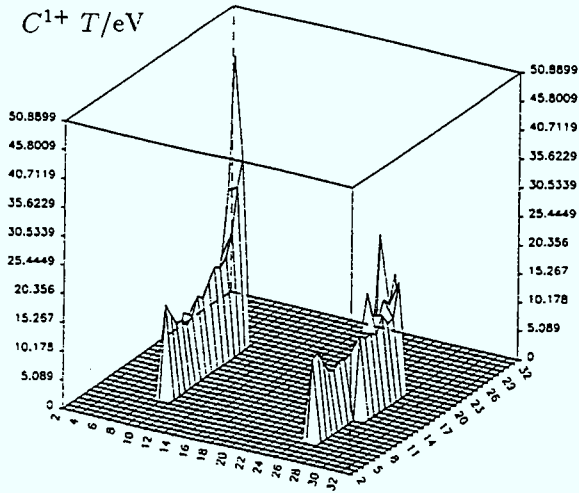


Abb.31
 $C^{2+} T/eV$

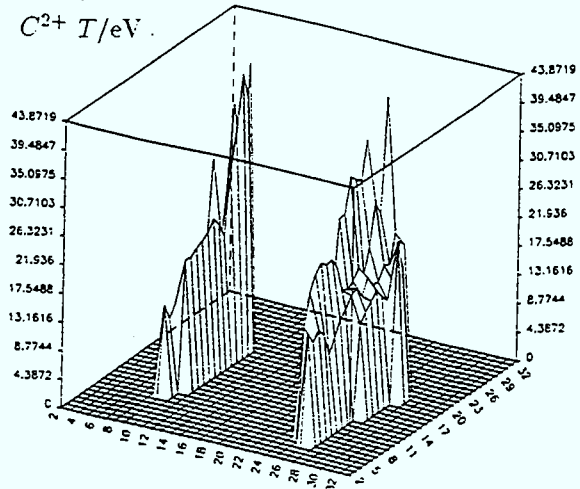


Abbildung 4.9: Temperaturprofile der Kohlenstoffionen aus der Monte-Carlo-Rechnung.

Abb.32
 $C^{3+} T/eV$

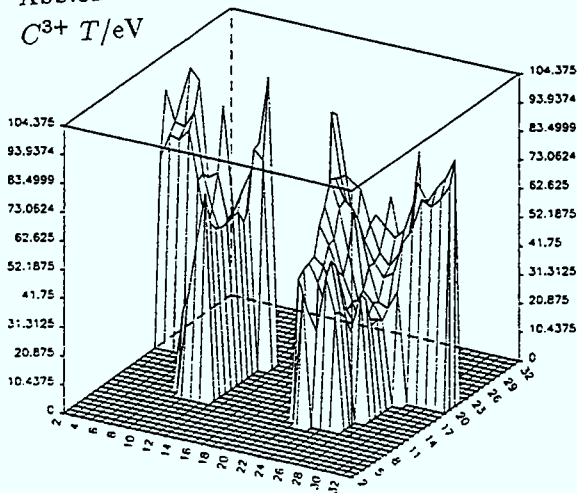


Abb.33
 $C^{4+} T/eV$

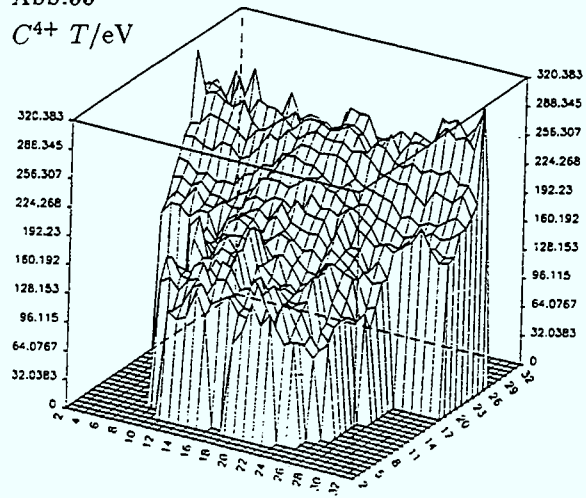


Abbildung 4.10: Temperaturprofile der Kohlenstoffionen aus der Monte-Carlo-Rechnung.

Abb.34

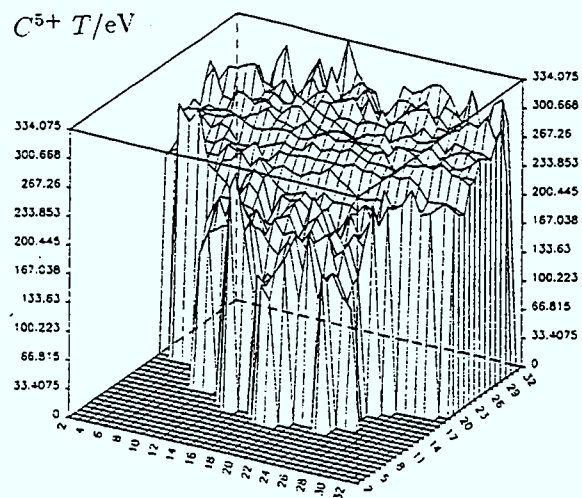
 $C^5+ T/eV$ 

Abb.35

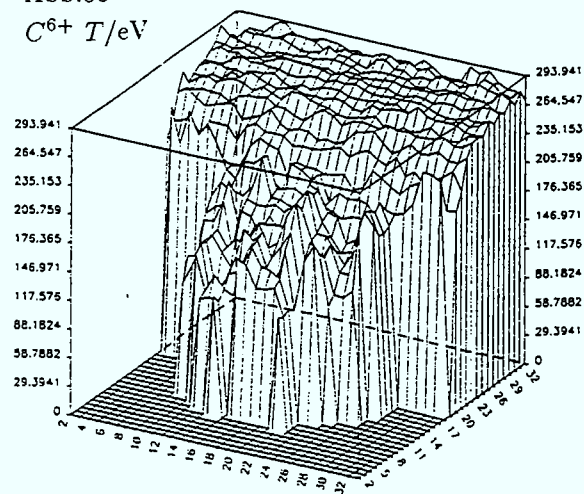
 $C^6+ T/eV$ 

Abbildung 4.11: Temperaturprofile der Kohlenstoffionen aus der Monte-Carlo-Rechnung.

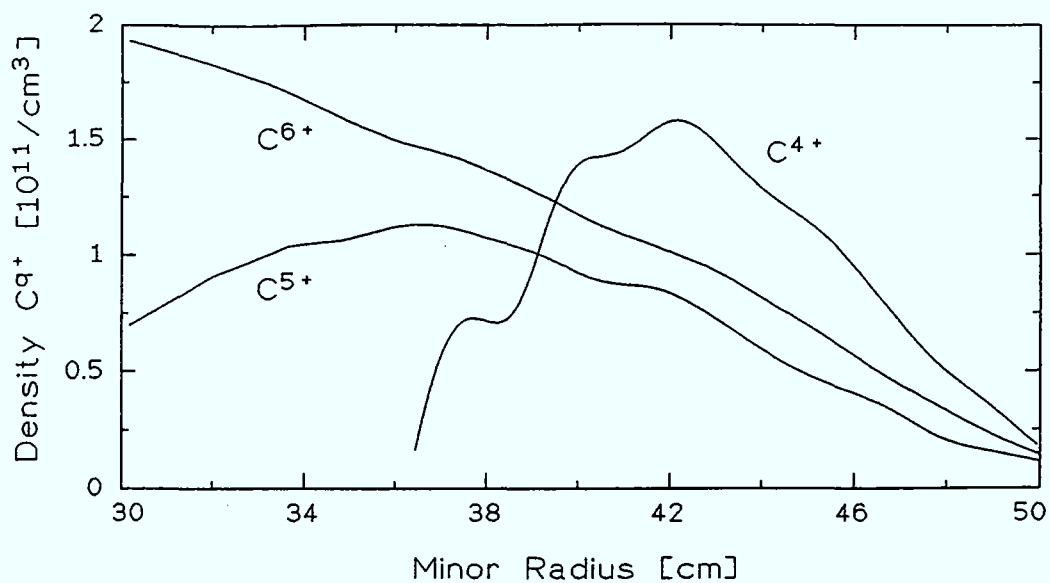


Abbildung 4.12: Experimentell ermittelte Dichteprofile für Kohlenstoffionen.

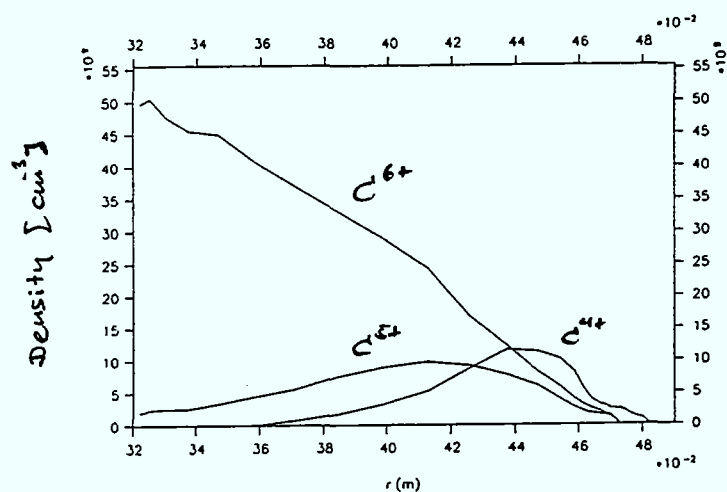


Abbildung 4.13: Dichteprofile der Kohlenstoffionen aus der Monte-Carlo-Rechnung.

Literaturverzeichnis

- [1] D. C. Montgomery and D. A. Tidman; "Plasma Kinetic Theory", McGraw-Hill, New York (1964)
- [2] B. A. Trubnikov; in "Reviews of Plasma Physics, Vol. I", ed. by M. A. Leontovich, Consultants Bureau, New York (1965)
- [3] S. I. Braginski; in "Reviews of Plasma Physics, Vol. I", ed. by M. A. Leontovich, Consultants Bureau, New York (1965)
- [4] Sivukhin; in "Reviews of Plasma Physics, Vol. I", ed. by M. A. Leontovich, Consultants Bureau, New York (1965)
- [5] R. D. Hazeltine; Plasma Phys., Vol. 15, p. 77 (1977)
- [6] R. Balescu; "Transport Processes in Plasmas", North-Holland, Amsterdam (1988)
- [7] H. A. Claassen, H. Repp; in "Plasma Wall Interaction", Proc. Int. Symp. Jülich (1976)
- [8] C. W. Gardiner; "Handbook of Stochastic Methods", Springer, Berlin (1985)
- [9] C. Arnold; „Stochastische Differentialgleichungen“, R. Oldenbourg, München (1973)
- [10] P. C. Stangeby, J. D. Elder; J. Nucl. Mat., Vol. 196/198, p. 258 (1992)
- [11] M. Tokar; private communication
- [12] D. Reiter et al.; Plasma Physics and Contr. Fusion, Vol. 33, No. 13, pp. 1579-1600 (1991)
- [13] B. J. Braams; „A multi fluid code for simulation of the edge plasma in tokamaks“, in Net-Report EUR-FU IXII-80-87-68, Comm. of the European Communities (1987)
- [14] D. Reiter; „The EIRENE Code, Verion: Jan. 92 User Manual“, Berichte des Forschungszentrums Jülich, Nr. 2599 (1992)

- [15] W. Eckstein et al., "Sputtering Data", Report IPP-9/82, Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Garching (1993)

Zusammenfassung und Ausblick

Es wurde gezeigt unter welchen Annahmen der Verunreinigungstransport in Plasmen im Rahmen der kinetischen Theorie durch eine einzelne lineare kinetische Gleichung vom Fokker-Planck-Typ beschrieben werden kann. Die Entkopplung einer Gleichung für die Verunreinigungen wurde durch die Testteilchen-Näherung möglich. Dabei wird davon ausgegangen, daß die Verteilungsfunktion des Plasma-Hintergrundes nicht durch die Anwesenheit der Verunreinigungen gestört wird. Die Verteilung der Hintergrundteilchen jedoch beeinflußt die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion der Verunreinigungen durch Coulomb-Stöße. Mit der Annahme von verschobenen Maxwell-Verteilungen für die Verteilungsfunktionen der Hintergrundteilchen (Fluid-Beschreibung), läßt sich der Coulomb-Stoßterm für die Wechselwirkung zwischen Verunreinigungen und Hintergrund in analytischer Form angeben. Die Linearität der kinetischen Gleichung für die Testteilchen wird durch die Vernachlässigung der Selbstwechselwirkung der Testteilchen untereinander erreicht. Kinetische Gleichungen vom Fokker-Planck-Typ konnten für allgemeine Phasenraumkoordinaten $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ und driftkinetische Variablen $(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp})$ hergeleitet werden. In Phasenraumkoordinaten war dies trotz Einbeziehung allgemeiner elektromagnetischer Kräfte im Plasma problemlos möglich. Bei Verwendung der driftkinetischen Näherung konnte eine Fokker-Planck-Gleichung nur durch Vernachlässigung diverser Kraft-Terme abgeleitet werden, jedoch konnte der Coulomb-Stoßterm für praktisch relevante Fälle exakt transformiert werden.

Zur Lösung solcher kinetischen Gleichungen vom Fokker-Planck-Typ wurde ein Monte-Carlo-Algorithmus diskutiert. Er läßt sich streng aus der Theorie stochastischer Prozesse ableiten und stellt eine exakte Lösungsmethode für beliebige Fokker-Planck-Gleichungen dar. Um dies zu überprüfen und die Leistungsfähigkeit der Methode zu testen, wurden exakte analytische Lösungen einfacher Diffusionsprozesse numerisch reproduziert (Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß, Kramer-Gleichung, Coulomb-Stoßprozesse). Die Testrechnungen für Coulomb-Stoßprozesse zeigten, daß der Algorithmus das korrekte Thermalisierungsverhalten (im Grenzfall der linearen Testteilchen-Näherung) sowohl für den dreidimensionalen Coulomb-Stoßoperator als auch für den Stoßoperator in driftkinetischen Variablen wiedergibt.

Eine Erweiterung des Monte-Carlo-Algorithmus um Sprungprozesse, die die Gesamtzahl der Simulationsteilchen einer bestimmten Ionisationsstufe stochastischen Schwankungen unterwerfen, läßt die Einbeziehung von Ionisation, Rekombination, Sputtering und ähnlichen Prozessen in die Verunreinigungssimulation zu. Ein FORTRAN-Code wurde entwickelt, der auf der beschriebenen Methode beruht und geeignet ist, den Verunreinigungstransport in komplexer Geometrie zu untersuchen. Unter Vernachlässigung elektrischer Felder im Plasma wurden erste praktische Rechnungen für TEXTOR-Randschicht-Plasmen unternommen. Untersucht wurden die Dichte- und Temperaturprofile von Kohlenstoffionen vor ei-

nem Plasma-Hintergrund, der durch Resultate aus EB2-EIRENE-Rechnungen gegeben war. Die Ergebnisse zeigten, daß die Anwendung der Monte-Carlo-Methode insbesondere für die niedrigen Ladungszustände C^{1+} und C^{2+} wichtig ist, da ihre Kurzlebigkeit infolge schneller Ionisation eine vollständige Thermalisierung verhindert. Die korrekte Berechnung der Temperatur (thermische Energie) dieser Teilchenspezies stellt für andere Methoden, wie z. B. Fluid-Modellierung, ein Problem dar, da nicht nur für eine Thermalisierung, sondern auch für eine Maxwellisierung die Lebensdauer und Stoßfrequenz nicht ausreichen. Daß die Profile der Kohlenstoffionen qualitativ eine korrekte Tendenz wiedergeben, jedoch eine um eine Größenordnung zu niedrige Dichte aufweisen, läßt vermuten, daß eine wesentliche Teilchenquelle vernachlässigt wurde (evtl. Selfsputtering oder chemische Zerstäubung).

Neben dem Vorzug der korrekten Behandlung der Thermalisierungsprozesse weist der Monte-Carlo-Algorithmus die Möglichkeit auf, problemlos komplizierte Randbedingungen und Quellverteilungen zu berücksichtigen. Als wesentlicher Nachteil der Methode ist die Vernachlässigung der Rückwirkung auf das Hintergrund-Plasma und der Selbstwechselwirkung zu nennen. Diese Mängel sollen in künftigen Arbeiten mit Hilfe verbesserter Methoden diskutiert und behoben werden.

Jül-3173
Januar 1996
ISSN 0944-2952